



第三章 固体晶体结构



大纲

CONTENTS

3.1 晶体的共性

3.2 布拉维空间点阵 原胞 晶胞

3.3 密堆积

3.4 晶列 晶面指数

3.5 倒格空间

3.6 晶体的对称性

3.7 晶格结构的分类





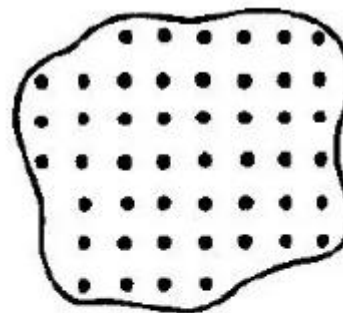
第一节 晶体的共性

3.1.1 固体的分类

3.1.2 晶体的共性

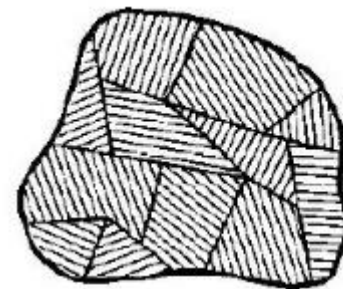


3.1.1 固体的分类(按结构)



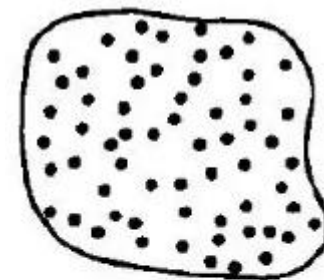
(a) Crystalline

单晶
有周期性



(c) Polycrystalline

多晶
每个小区域有周期性



(b) Amorphous

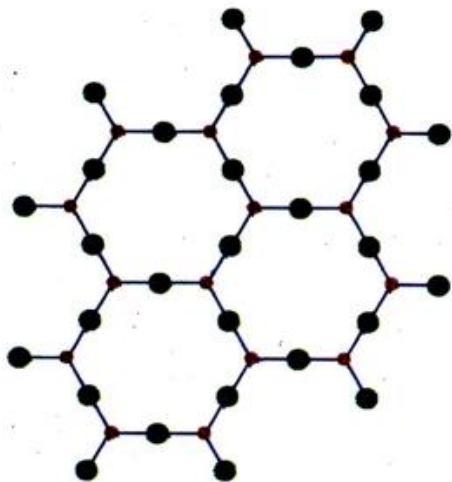
非晶
无周期性

固体 { 晶体: **长程有序**: { 单晶体
多晶体
非晶体: 不具有长程序的特点, 短程有序。
准晶体:

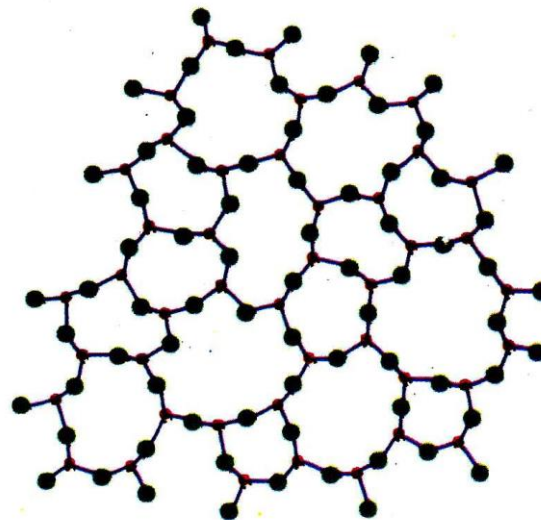
长程有序: 至少在微米量级范围内**原子排列**
具有周期性。



3.1.1 固体的分类(按结构)



(a) 晶体结构的规则网格

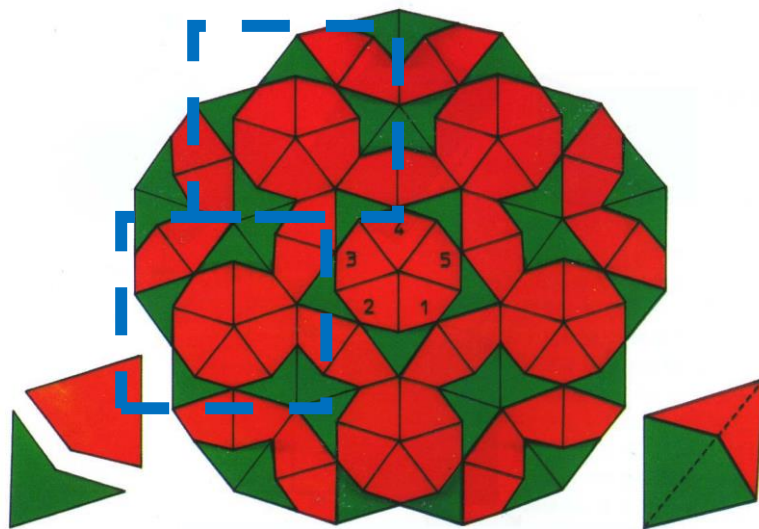
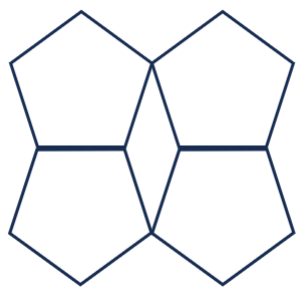


(b) 非晶体结构的无规则网格

非晶体中原子排列不具有长程的周期性，但基本保留了原子排列的短程序，即近邻原子的数目和种类、近邻原子之间的距离(键长)、近邻原子配置的几何方位(键角)都与晶体相近。



3.1.1 固体的分类(按结构)



(c) Penrose拼接图案

准晶体具有长程的取向序，但没有长程的平移对称序，
可以用**Penrose**拼接图案显示其结构特点。



3.1.2 晶体的共性

1、长程有序：

原子按一定规律排列，但原子排列的规律性，不只是在邻近区域原子范围内，而是遍及整个材料内部。通常将整个材料内部原子具有规律性的排列，称为长程有序（至少在微米数量级范围的有序排列）。原子长程有序时，即构成晶体。

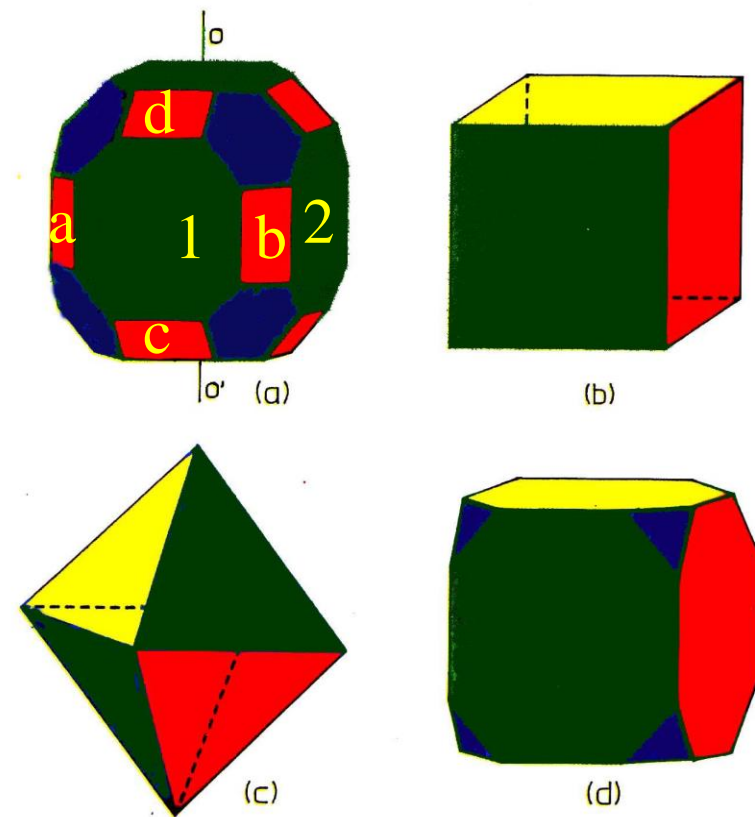
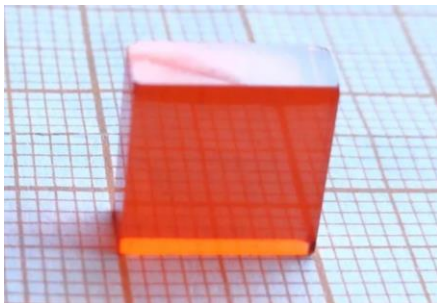
长程有序是晶体最突出的特点。



3.1.2 晶体的共性

2. 自限性：

晶体所具有的自发地形成封闭几何多面体的能力称为自限性。



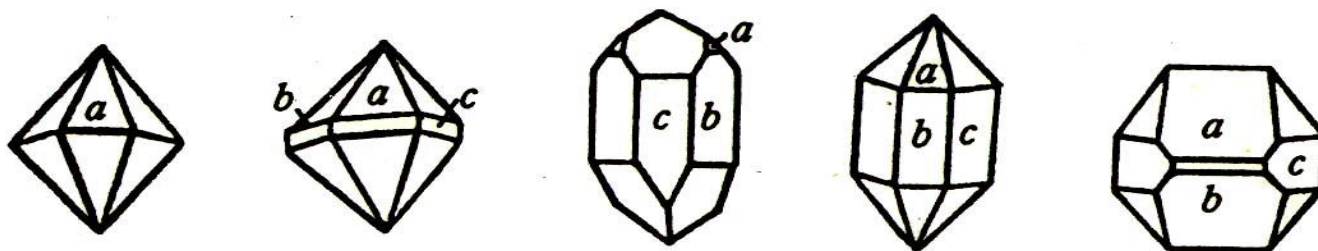
晶体的自限性是晶体内部原子的规则排列在晶体宏观形态的反映，本质为晶体中原子之间的结合，遵从能量最小原理。



3.1.2 晶体的共性

3. 晶面夹角守恒

同一种晶体，两个对应晶面间的夹角恒定不变。



石英晶体的若干外形

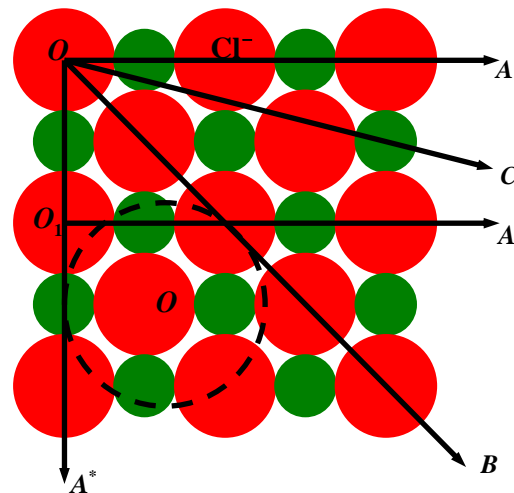


3.1.2 晶体的共性

4. 晶体的各向异性

在不同方向上，晶体的物理性质不同。

由右图可以看出，在不同的方向上晶体中原子排列情况不同，故其性质不同。



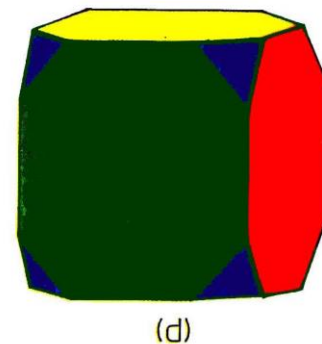
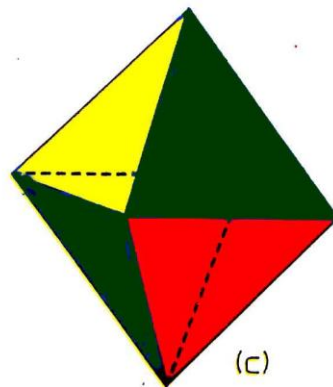
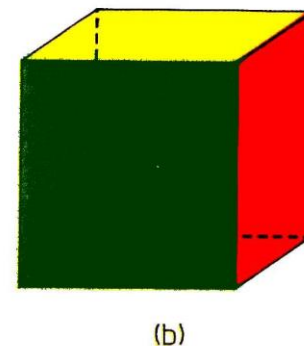
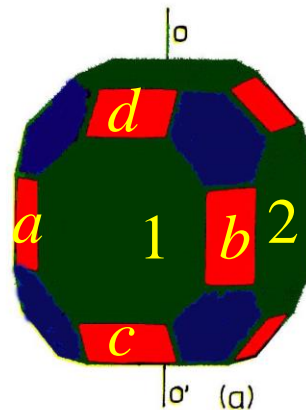
NaCl晶体结构(100)面示意图



3.1.2 晶体的共性

晶面的交线称为**晶棱**，晶棱互相平行的晶面的组合称为**晶带**，如右图中 a ，1， b ，2。

互相平行的晶棱的共同方向称为该晶带的**带轴**，**晶轴**是重要的带轴。如右图中 oo'





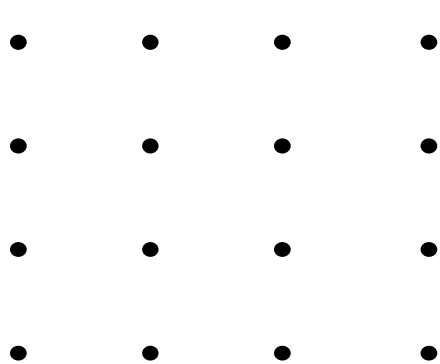
第二节 布拉维空间点阵、原胞、晶胞

3.2.1 晶体结构的周期性

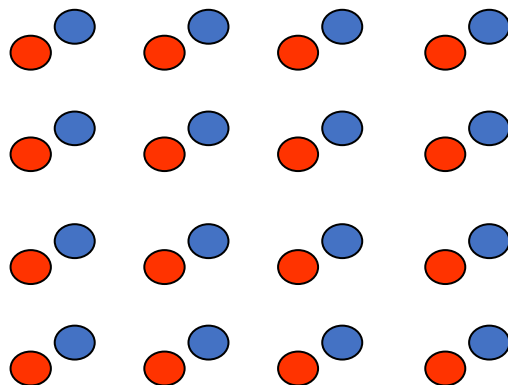
3.2.2 原胞 晶胞



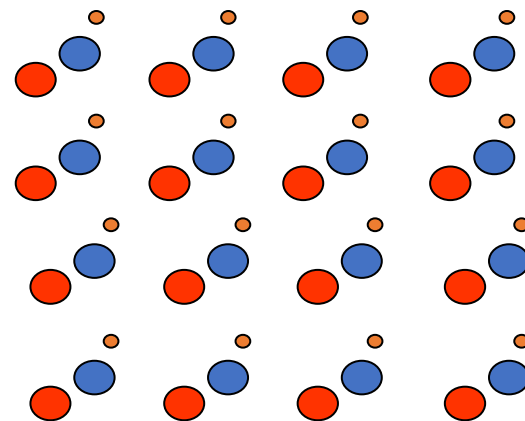
3.2.1 晶体结构的周期性



(a)



(b)



(c)

(a)、(b)、(c)为晶体结构的二维示意图，它们有何异同？



3.2.1 晶体结构的周期性

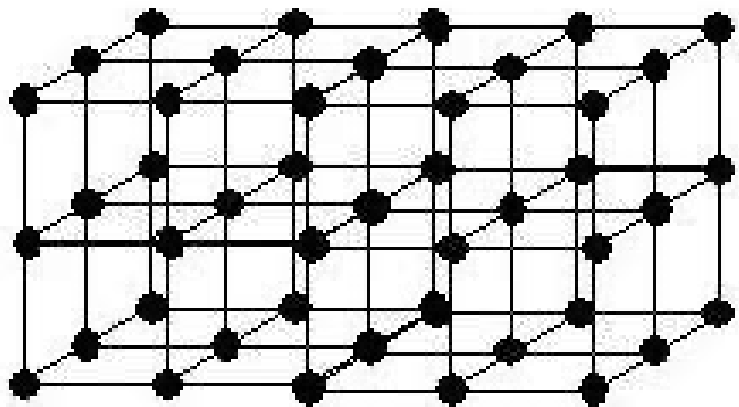
一个理想的晶体是由**完全相同的结构单元**在空间**周期性重复排列**而成的。

如何描述晶体中原子排列的有序性？

布拉维（Bravais）提出**空间点阵学说**：晶体内部结构可以看出是由一些相同的点在空间作规则的周期性的无限分布。这些点的总体成为**布拉维点阵**。



3.2.1 晶体结构的周期性



(b) 晶格

晶格是晶体结构周期性的数学抽象，它忽略了晶体结构的具体内容，保留了晶体结构的周期性。

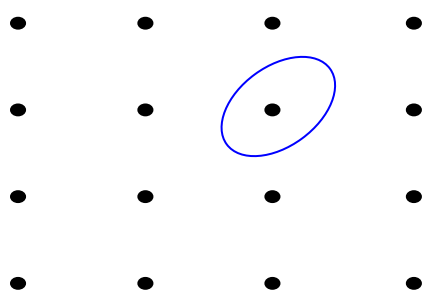
通过这些**结点**做三组不共面的平行直线族，形成一些网格，称为**晶格**（或者说这些点在空间周期性排列形成的骨架称为晶格）。所有晶体的结构可以用晶格来描述。

晶格的每个**格点（结点）**上附有一群原子，这样的原子群称为**基元**，基元在空间周期性重复排列就形成**晶体结构**。

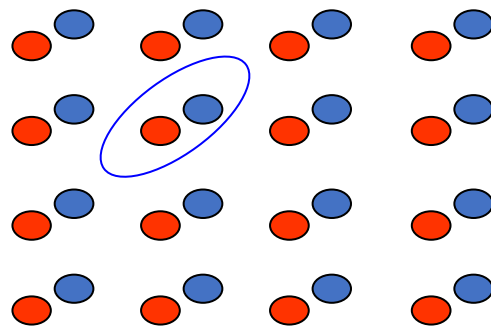


3.2.1 晶体结构的周期性

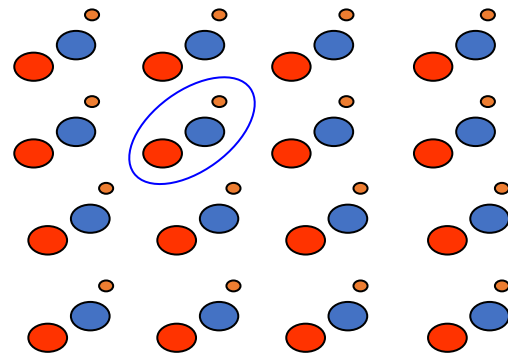
基元、格点和晶格



(a)



(b)



(c)

基元

在晶体中适当选取某些原子作为一个**基本结构单元**，这个基本结构单元称为**基元**，基元是晶体结构中**最小的重复单元**，基元在空间周期性重复排列就形成晶体结构。

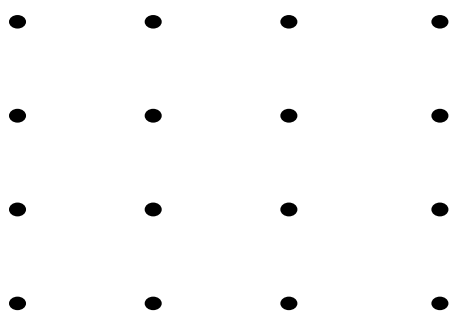
任何两个基元中相应原子周围的情况是相同的，而每一个基元中不同原子周围情况则不相同。



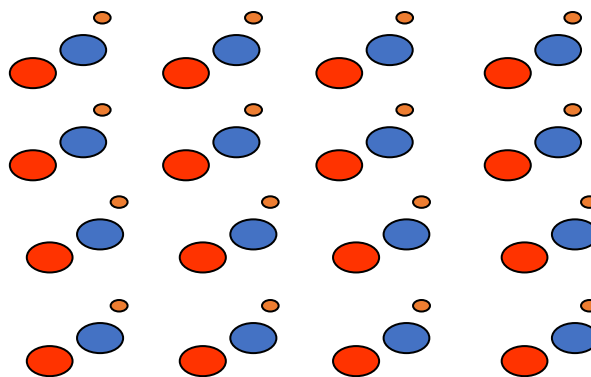
3.2.1 晶体结构的周期性

格点 晶格中的点子代表着晶体结构中相同的位置，称为**格点**。

一个格点代表一个基元，它可以代表基元中心的位置，也可以代表基元中任意的点子。



(a)



(b)

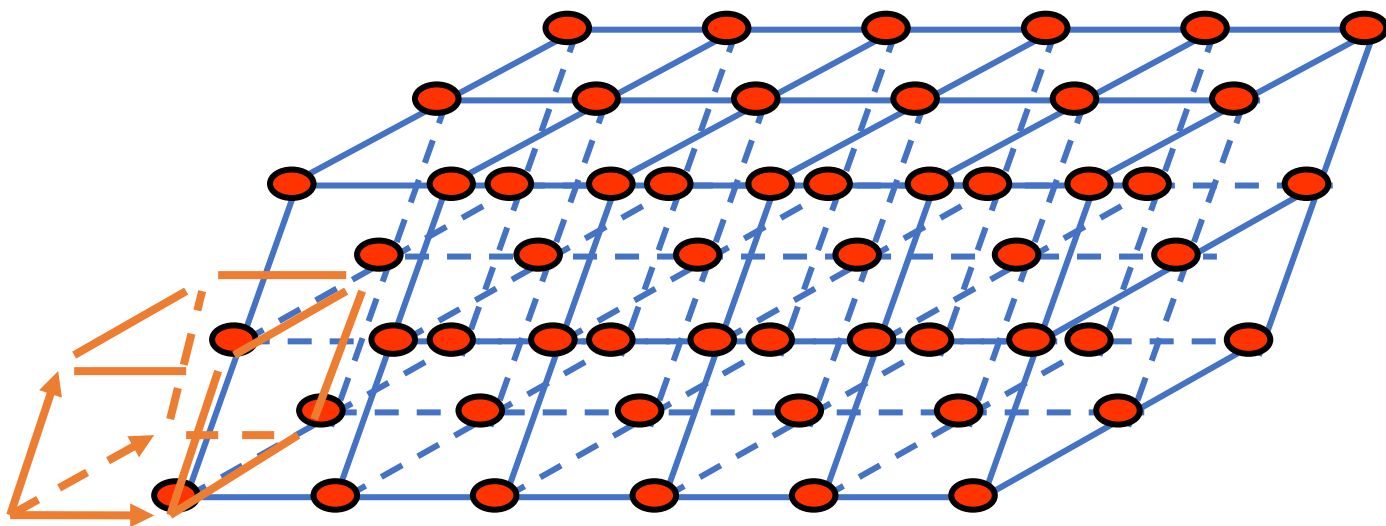
晶格+基元=晶体结构



3.2.2 原胞 晶胞

1. 原胞

在晶格中取一个格点为顶点，以三个不共面的方向上的周期为边长形成的平行六面体作为重复单元，这个平行六面体沿三个不同的方向进行周期性平移，就可以充满整个晶格，形成晶体，这个平行六面体即为**原胞**，代表原胞三个边的矢量称为原胞的基本平移矢量，简称**基矢**。





3.2.2 原胞 晶胞

特点：**格点**只在平行六面体的顶角上，**面上和内部均无格点**，**平均每个原胞包含1个格点**。它反映了晶体结构的周期性。

原胞是一个晶格中最小重复单元（体积最小）。

原胞基矢：通常用 $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ 表示。

体积为：
$$\Omega = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$$

原胞内任一点的位矢表示为：

$$\vec{r} = x_1 \vec{a}_1 + x_2 \vec{a}_2 + x_3 \vec{a}_3 \quad (0 \leq x_1, x_2, x_3 \leq 1)$$



3.2.2 原胞 晶胞

引例3

平行六面体的体积

已知三个不共面的向量 $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$, 求以这三个向量为棱的平行六面体的体积。

因为平行六面体的体积 V 等于底面积 S 乘以高 h , 即

$$V = Sh。$$

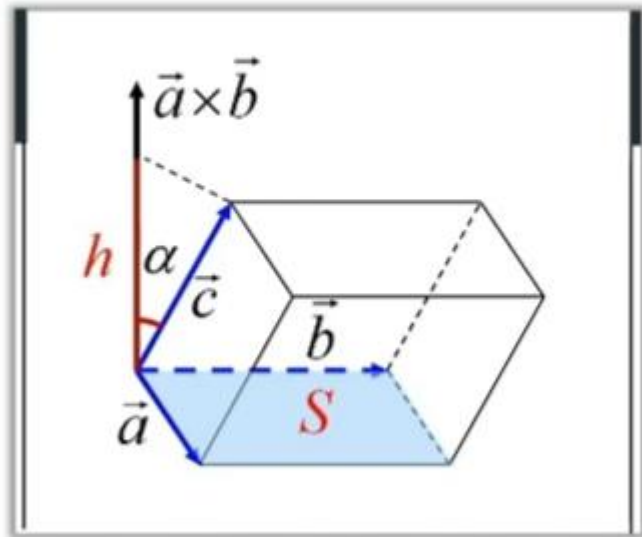
由向量的向量积的性质可知,

$$\text{底面积 } A = |\vec{a} \times \vec{b}|,$$

$$\text{高 } h = |\vec{c}| |\cos \alpha|,$$

故平行六面体体积为

$$V = Ah = |\vec{a} \times \vec{b}| |\vec{c}| |\cos \alpha| = |(\vec{a} \times \vec{b}) \cdot \vec{c}|。$$





3.2.2 原胞 晶胞

(2) 晶胞

构造：使三个基矢的方向尽可能地沿着空间对称轴的方向，它具有明显的对称性和周期性。

特点：晶胞不仅在平行六面体顶角上有格点，面上及内部亦可有格点。其体积是晶胞体积的整数倍。

晶胞的基矢：一般用 $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ 表示。

体积为：

$$v = \vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c}) = n \Omega$$

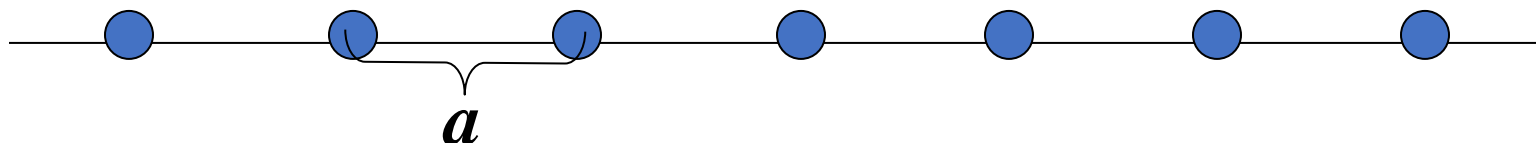


3.2.2 原胞 晶胞

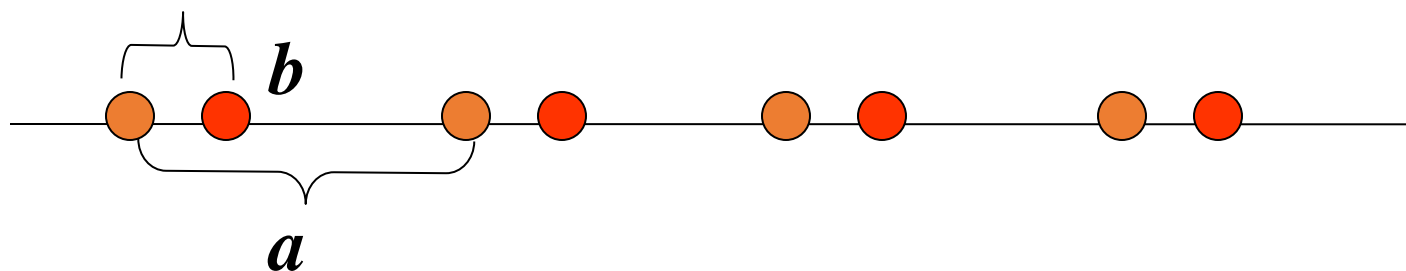
2. 几种晶格的实例

(1) 一维原子链

一维单原子链



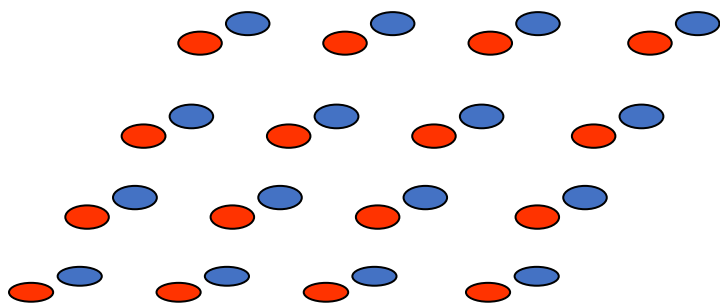
一维双原子链



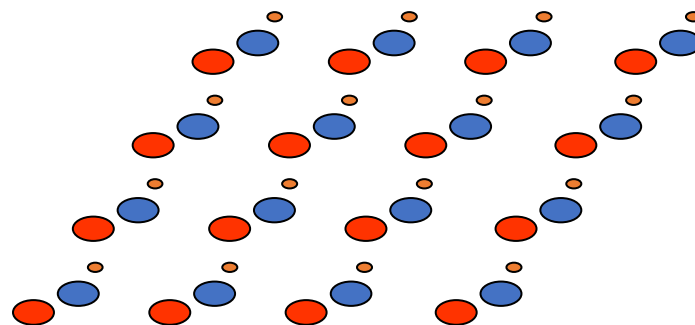


3.2.2 原胞 晶胞

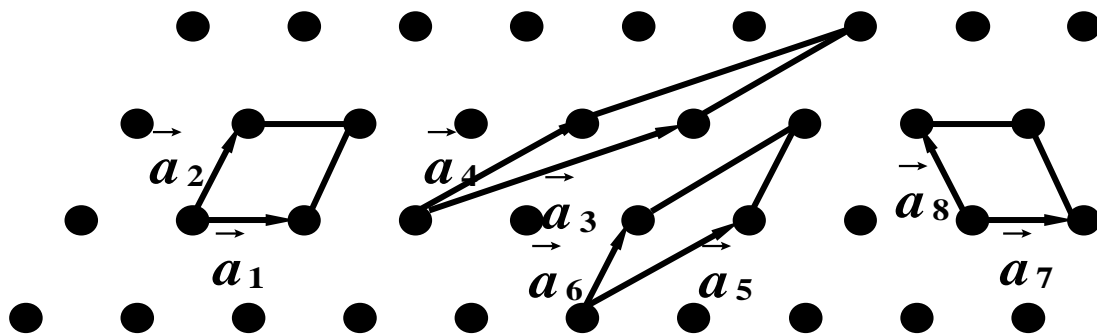
(2) 二维



(a)



(b)



原胞



3.2.2 原胞 晶胞

(3) 三维

立方晶系 $\vec{a} \perp \vec{b}$ $\vec{b} \perp \vec{c}$ $\vec{c} \perp \vec{a}$ $a = b = c$

取 $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$ 为坐标轴的单位矢量,

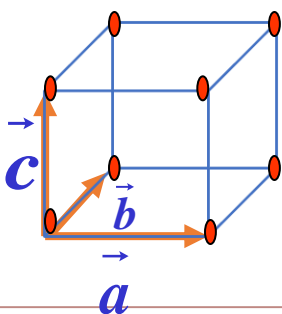
设**晶格常量**(晶胞棱边的长度)为 a ,

即立方体边长为 a , $\vec{a} = a\vec{i}, \vec{b} = a\vec{j}, \vec{c} = a\vec{k}$

晶胞的体积: $V = a^3$

简立方晶格原胞就是晶胞

(a) 简立方



$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{a}_1 = a\vec{i} \\ \vec{a}_2 = a\vec{j} \\ \vec{a}_3 = a\vec{k} \end{array} \right.$$

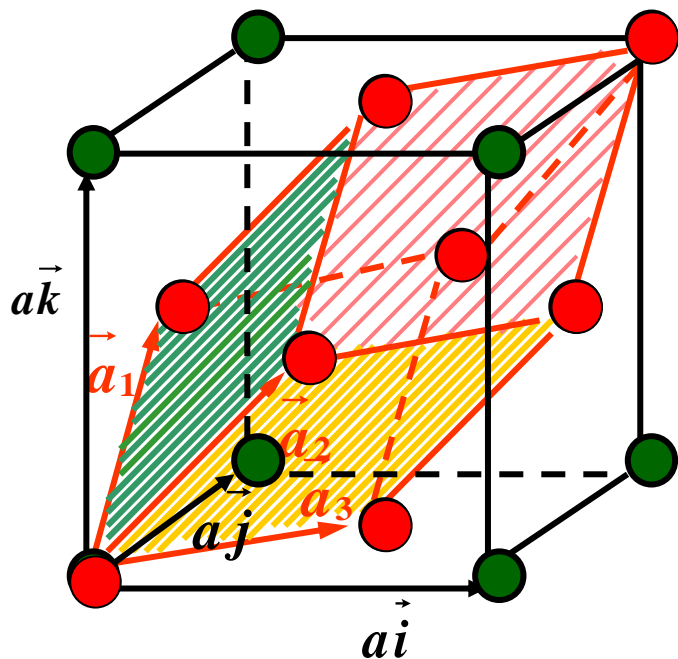
每个晶胞包含 1 个格点。

原胞的体积 $\Omega = a^3$



3.2.2 原胞 晶胞

(b) 面心立方



$$\left\{ \begin{aligned} \vec{a}_1 &= \frac{a}{2} (\vec{j} + \vec{k}) \\ \vec{a}_2 &= \frac{a}{2} (\vec{i} + \vec{k}) \\ \vec{a}_3 &= \frac{a}{2} (\vec{i} + \vec{j}) \end{aligned} \right.$$

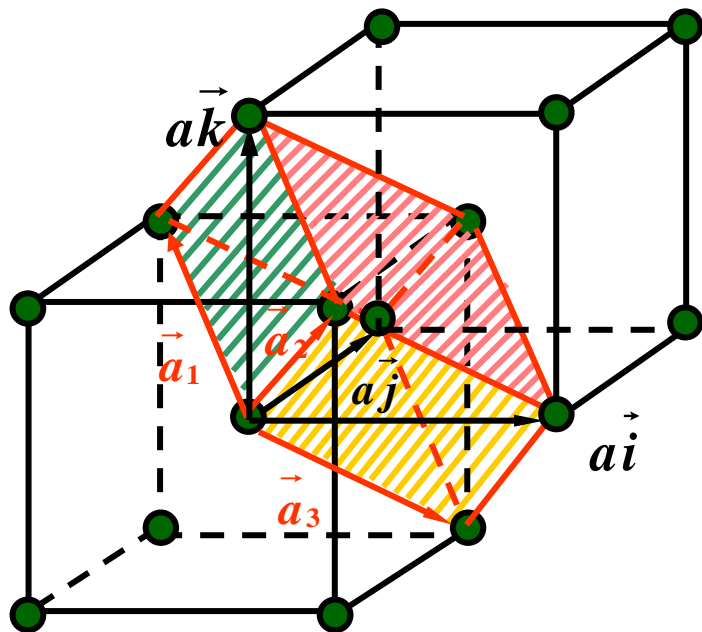
原胞包含1个格点，晶胞包含4个格点。

原胞的体积 $\Omega = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) = \frac{1}{4} a^3$



3.2.2 原胞 晶胞

(c) 体心立方



$$\begin{cases} \vec{a}_1 = \frac{a}{2}(-\vec{i} + \vec{j} + \vec{k}) \\ \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\vec{i} - \vec{j} + \vec{k}) \\ \vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\vec{i} + \vec{j} - \vec{k}) \end{cases}$$

每个晶胞包含**2**个**格点**。

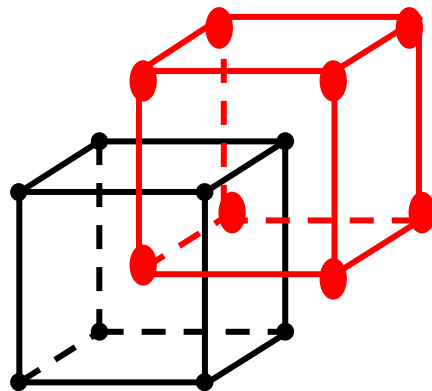
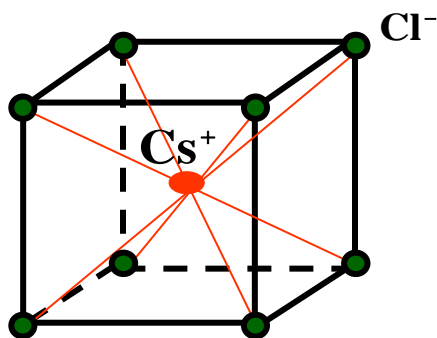
原胞的体积 $\Omega = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) = \frac{1}{2}a^3$



3.2.2 原胞 晶胞

复式晶格

(a) 氯化铯结构



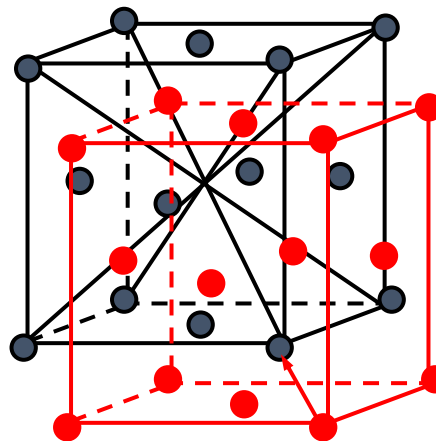
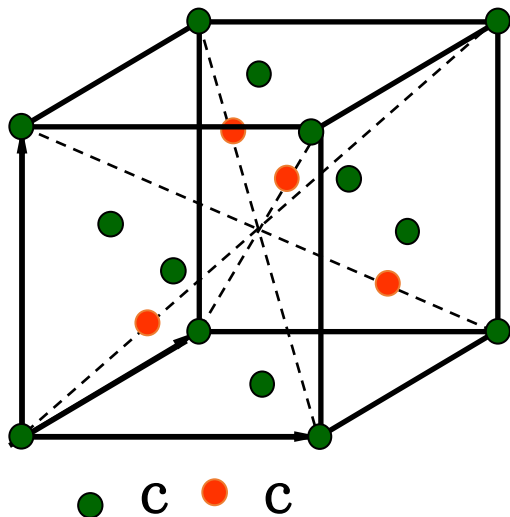
氯化铯结构是由两个简立方子晶格沿体对角线位移 $1/2$ 的长度套构而成。 Cl^- 和 Cs^+ 分别组成简立方格子，其晶胞为简立方，氯化铯结构属简立方。基元由一个 Cl^- 和一个 Cs^+ 组成。

每个原胞包含1个格点，每个晶胞包含1个格点。



3.2.2 原胞 晶胞

(b) 金刚石结构



金刚石结构是由两个面心立方子晶格沿体对角线位移 $1/4$ 的长度套构而成, 其晶胞为面心立方。

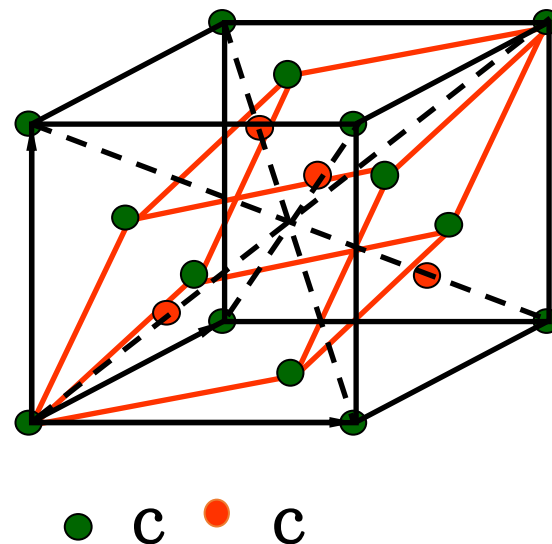
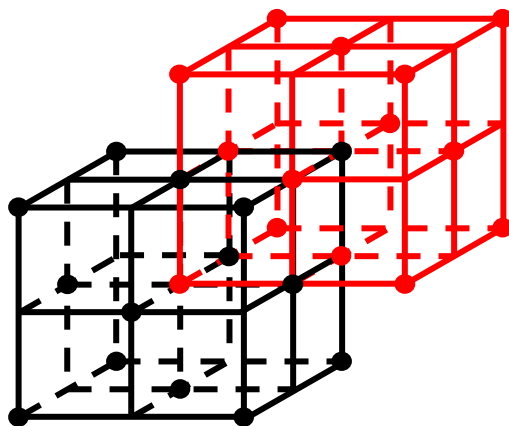
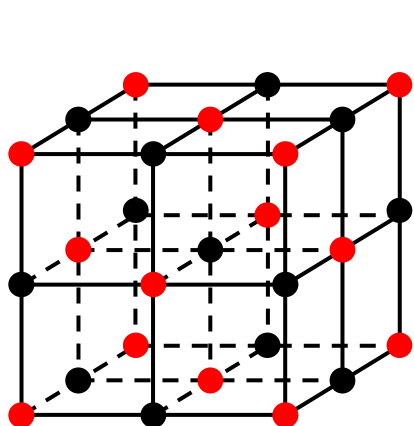
金刚石结构属面心立方, 每个晶胞包含4个格点。

金刚石结构每个原胞包含1个格点, 基元由两个碳原子组成, 位于 (000) 和 $(\frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4})$ 处。



3.2.2 原胞 晶胞

(c) 氯化钠结构



氯化钠结构由两个面心立方子晶格沿体对角线位移 $1/2$ 的长度套构而成。

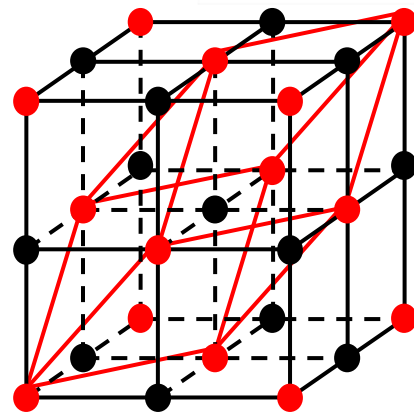


3.2.2 原胞 晶胞

Cl^- 和 Na^+ 分别组成面心立方子晶格。

其晶胞为面心立方。

氯化钠结构属面心立方。



氯化钠的原胞选取方法与面心立方简单格子的选取方法相同。

每个原胞包含1个格点，每个晶胞包含4个格点。

基元由一个 Cl^- 和一个 Na^+ 组成。



3.2.2 原胞 晶胞

几种常见的晶格结构：

简单立方

体心立方

面心立方

氯化铯结构

金刚石结构

氯化钠结构

六角密堆或密排六方

闪锌矿ZnS结构

钙钛矿结构

换个角度去理解晶体的简单晶格结构



把晶格设想成为原子球的规则排列，有助于比较直观地理解晶格的组成。

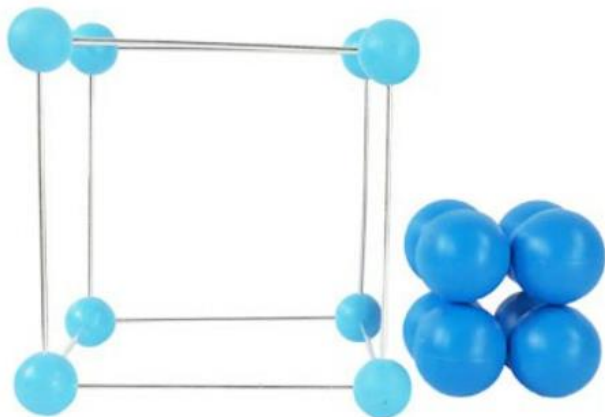


第三节 密堆积、配位数和致密度

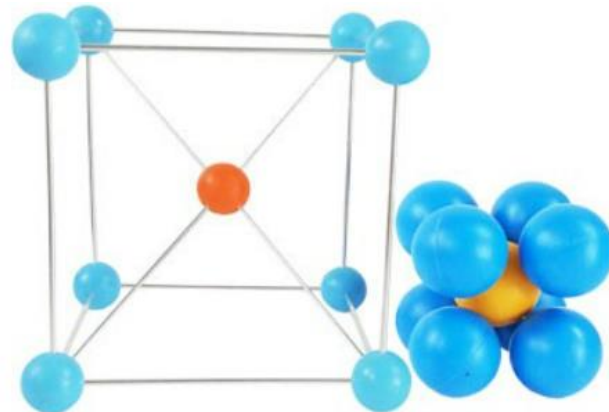


密堆积、配位数和致密度

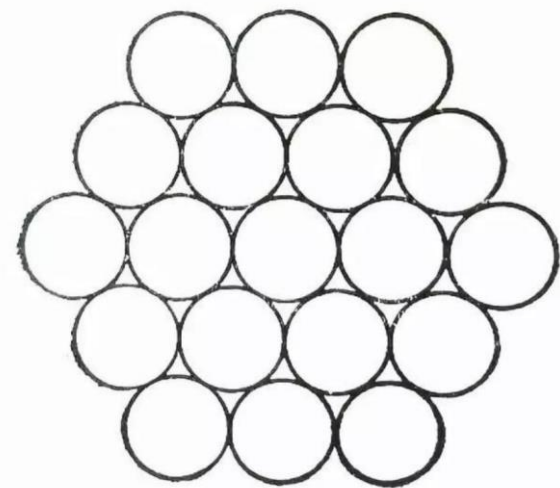
简单立方结构



体心立方结构



以上两种堆积并不是最紧密的堆积方式。几何证明，原子球要构成最紧密的堆积方式，必须与同一平面内相邻的6个原子球相切，如右图所示。这样的原子面为密排面。**要达到最紧密堆积，相邻原子层也必须是密排面，而且原子心必须与相邻原子层的空隙相重合。** 平面内的原子密排





密堆积、配位数和致密度

1. 密堆积

如果晶体由**完全相同的一种粒子**组成，而粒子被看作小圆球，则这些全同的小圆球最紧密的堆积称为**密堆积**。

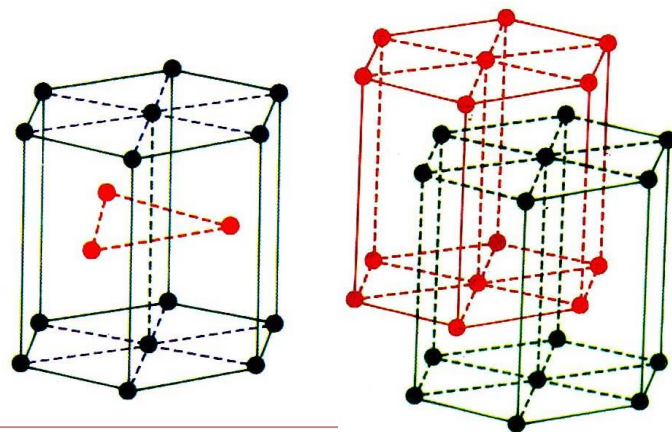
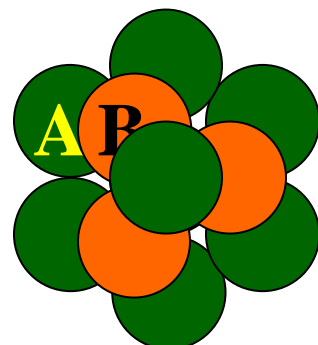
(1) 六角密排

第一层：每个球与6个球相切，有6个空隙，
如编号1, 2, 3, 4, 5, 6。

第二层：占据1, 3, 5空位中心。

第三层：在第一层球的正上方

形成**ABABAB……**排列方式。

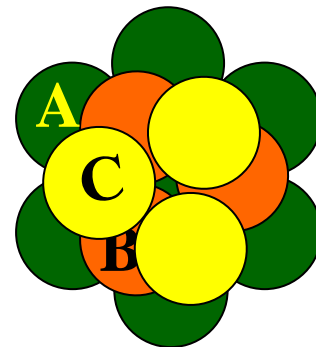




密堆积、配位数和致密度

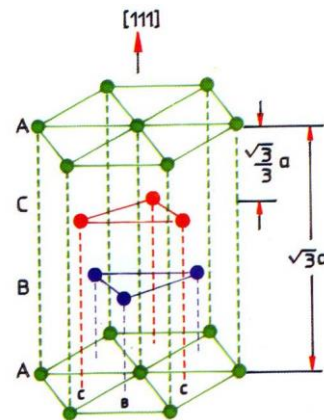
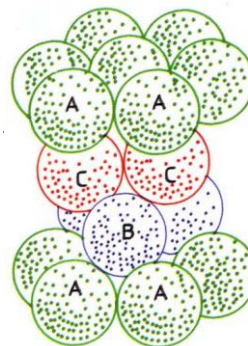
(2) 立方密排

第一层：每个球与6个球相切，有6个空隙，如编号为1, 2, 3, 4, 5, 6。



第二层：占据1, 3, 5空位中心

第三层：占据2, 4, 6空位中心
按ABCABCABC……方式排列，形成面心立方结构，称为立方密排。





密堆积、配位数和致密度

2. 配位数

一个粒子周围 *最近邻的粒子数* 称为 **配位数**。

它可以描述晶体中粒子排列的紧密程度，粒子排列越紧密，配位数越大。

在 **六角和立方两种密堆积** 结构中，每个球在同-层内和6个球相邻，和上下层的3个球相切，所以每个球最近邻的球数是12，即 **配位数是12**，这就是晶体结构中最大的配位数。

晶体结构	配位数
面心立方 六角密排	12
体心立方	8
简单立方	6



密堆积、配位数和致密度

3. 致密度：

如果把等体积的硬球放置在晶体结构中原子所在的位置上，球的体积取得尽可能大，以使最近邻的球相切，我们把一个晶胞中被硬球占据的体积和晶胞体积之比称为**致密度**（堆积比率或最大空间利用率）。



密堆积、配位数和致密度

例：求面心立方的致密度。

设晶格常量(晶胞棱边的长度)为 a ，原子半径为 R ，则

$$V = a^3 \quad \text{晶胞体积}$$

$$v = N \frac{4}{3} \pi R^3 \quad \text{晶胞中原子所占体积}$$

$$4R = \sqrt{2}a \quad N \text{是晶胞中原子个数}$$

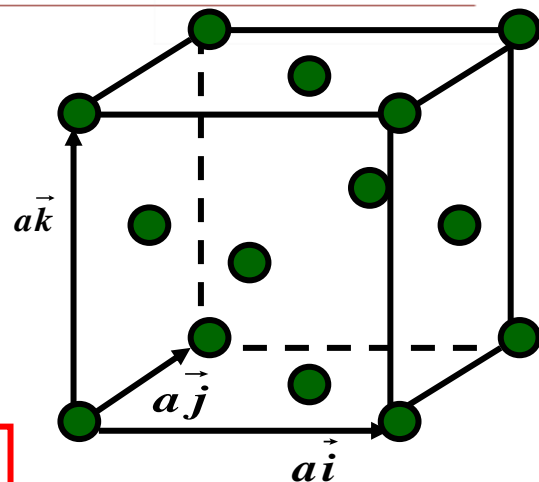
$$N = n_i + \frac{1}{2}n_f + \frac{1}{4}n_e + \frac{1}{8}n_c$$

内部原子数

面上原子数

棱上原子数

顶角上原子数





密堆积、配位数和致密度

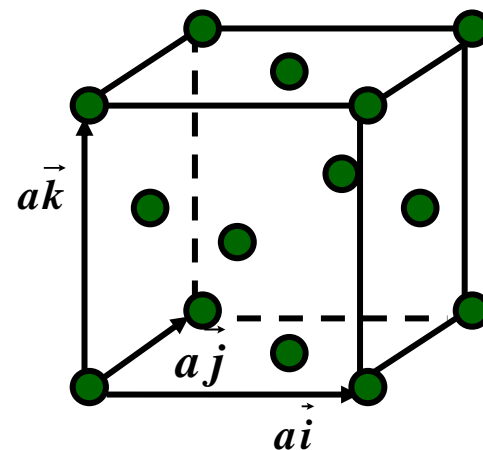
$$N = n_i + \frac{1}{2}n_f + \frac{1}{4}n_e + \frac{1}{8}n_c$$

$$N = \frac{1}{2} \times 6 + \frac{1}{8} \times 8 = 4$$

致密度: $\rho = \frac{v}{V}$

$$= 4 \times \frac{4}{3} \pi \left(\frac{\sqrt{2}}{4} \right)^3$$

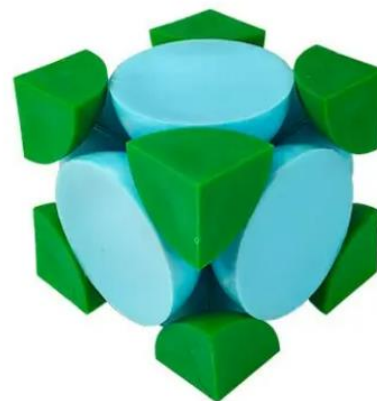
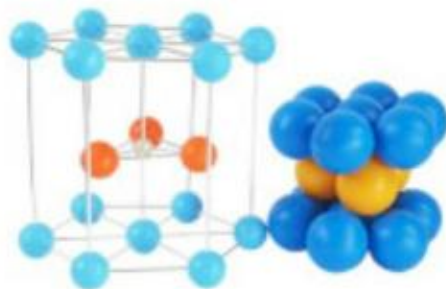
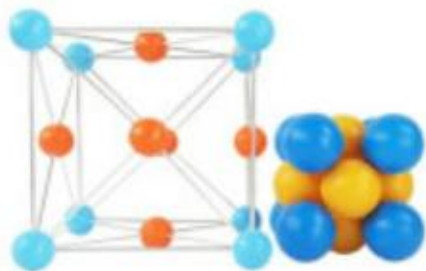
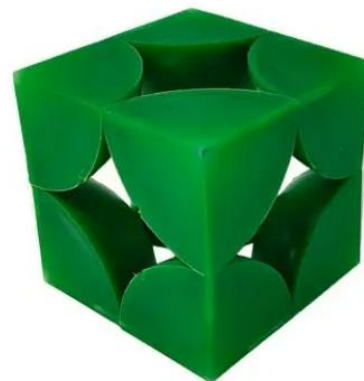
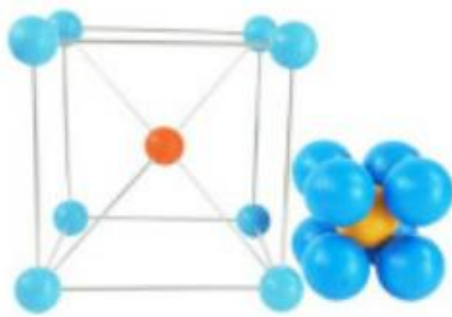
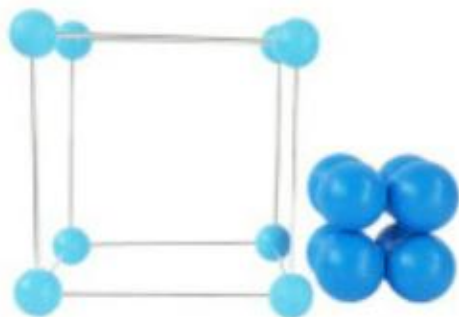
$$= \frac{\sqrt{2}}{6} \pi$$



$$\begin{cases} V = a^3 \\ v = N \frac{4}{3} \pi R^3 \\ 4R = \sqrt{2}a \end{cases}$$



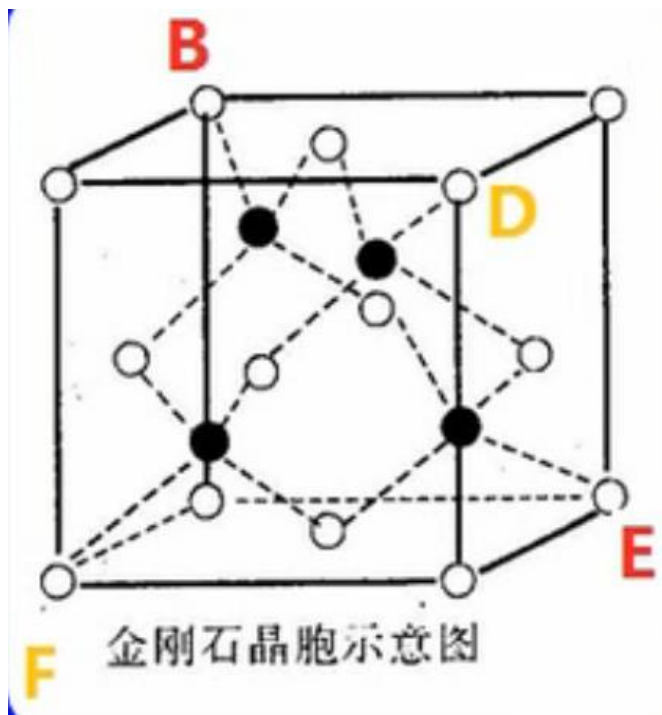
密堆积、配位数和致密度





密堆积、配位数和致密度

作业1：求简单立方、体心立方、金刚石结构和六角密排的致密度。





密堆积、配位数和致密度

不同晶体结构的致密度

晶体结构	致密度 (%)
简单立方	52.4
体心立方	68.0
面心立方、六角密排	74.0
金刚石结构	34.0



晶体的一个基本特点是具有方向性，
沿晶格的不同方向晶体性质不同，
那么怎么来区别和标志晶格中的不同方向呢？



第四节 晶列、晶面指数

3.4.1 晶列、晶向及晶向指数

3.4.2 晶面及密勒指数

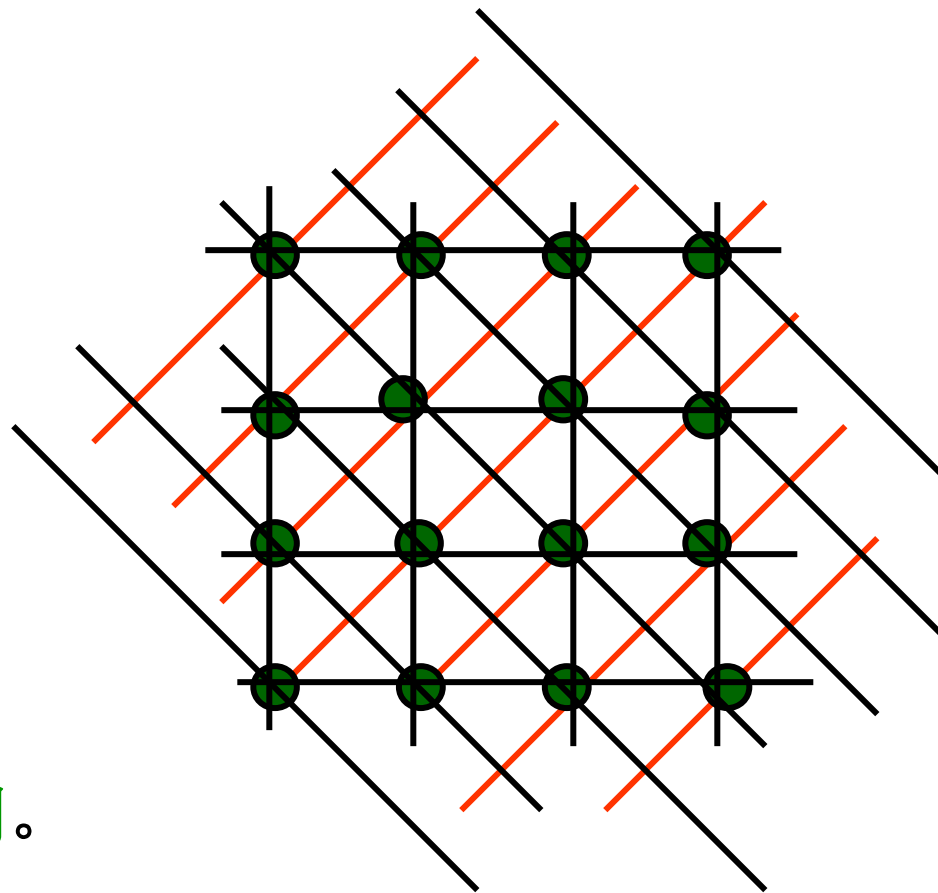


3.4.1 晶列、晶向及晶向指数

1. 晶向

通过晶格中任意两个格点连一条直线称为**晶列**，晶列的取向称为**晶向**，描写晶向的一组数称为**晶向指数**(或**晶列指数**)。

过一格点可以有无数**晶列**。

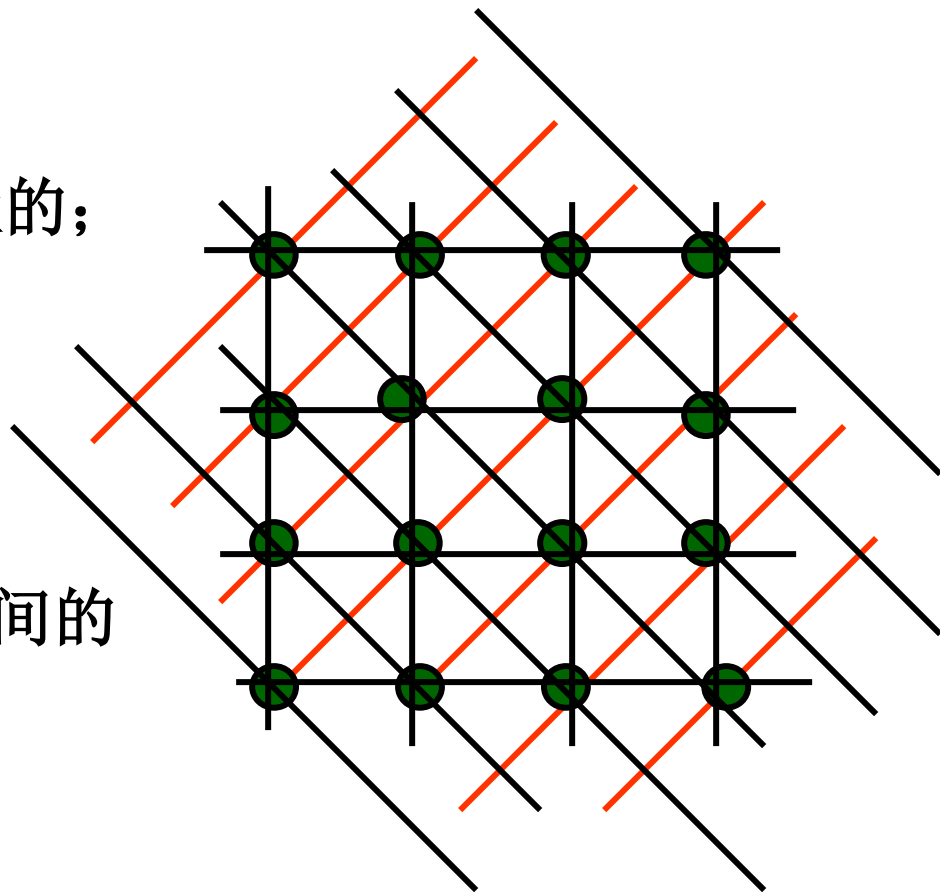




3.4.1 晶列、晶向及晶向指数

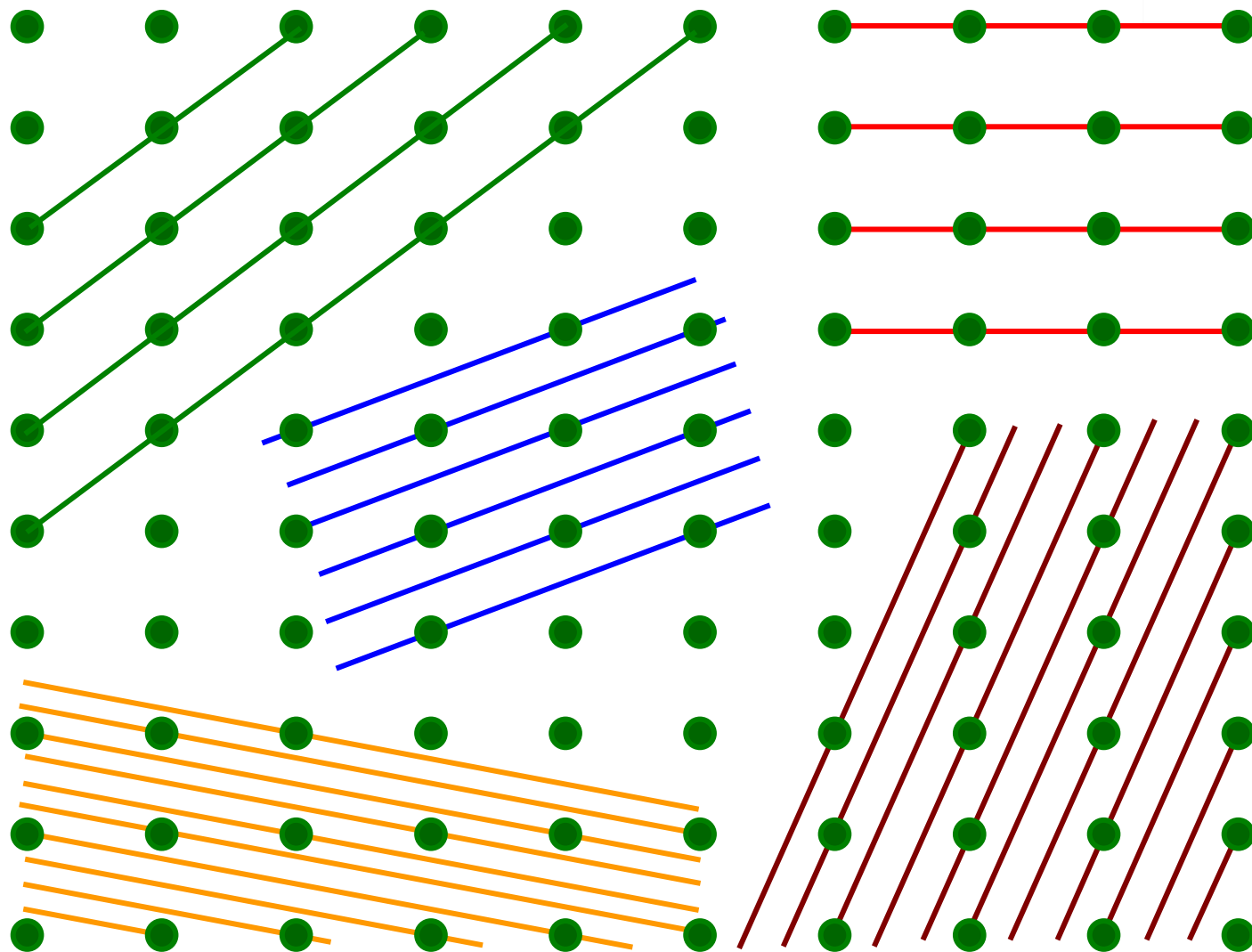
晶列的特点：

- (1) 平行晶列组成晶列族，晶列族包含所有的格点；
- (2) 晶列上格点分布是周期性的；
- (3) 晶列族中的每一晶列上，格点分布都是相同的；
- (4) 在同一平面内，相邻晶列间的距离相等。





3.4.1 晶列、晶向及晶向指数



二维晶格中的不同晶向



3.4.1 晶列、晶向及晶向指数

2. 晶向指数

(1) 用原胞基矢表示

如果从晶列上一个格点（取为原点）沿晶向到任一格点的位矢为：

$$\vec{R} = l'_1 \vec{a}_1 + l'_2 \vec{a}_2 + l'_3 \vec{a}_3$$

$\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ 为原胞基矢

其中 l'_1, l'_2, l'_3 为整数，将 l'_1, l'_2, l'_3 化为互质的整数 l_1, l_2, l_3 ，记为 $[l_1 l_2 l_3]$ ， $[l_1 l_2 l_3]$ 即为该晶列的晶列指数。

如遇到负数，将该数的上面加一横线。

如 $[\overline{1} 2 1]$ 表示 $l_1 = 1, l_2 = -2, l_3 = 1$



3.4.1 晶列、晶向及晶向指数

(2) 以晶胞基矢表示

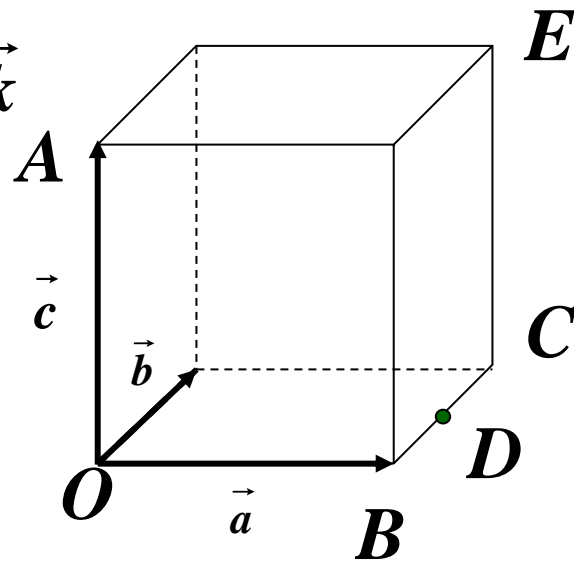
如果从晶列上一个格点沿晶向到任一格点的位矢为

$$\vec{R} = m'\vec{a} + n'\vec{b} + p'\vec{c} \quad (\vec{a}, \vec{b}, \vec{c} \text{ 为晶胞基矢} \quad \text{③})$$

其中 m', n', p' 为有理数, 将 m', n', p' 化为互质的整数 m, n, p , 记为 $[mnp]$, $[mnp]$ 即为该晶列的晶列指数.

例1: 如图在立方体中, $\vec{a} = \vec{i}, \vec{b} = \vec{j}, \vec{c} = \vec{k}$
 D 是 BC 的中点, 求 BE, AD 的晶列指数。

解: $\vec{OB} = \vec{i}, \quad \vec{OE} = \vec{i} + \vec{j} + \vec{k},$
 $\vec{BE} = \vec{OE} - \vec{OB} = \vec{j} + \vec{k}$



晶列 BE 的晶列指数为: $[011]$



3.4.1 晶列、晶向及晶向指数

求AD的晶列指数。

$$\overrightarrow{OA} = \vec{k}, \quad \overrightarrow{OD} = \vec{i} + \frac{1}{2}\vec{j},$$

$$\overrightarrow{AD} = \overrightarrow{OD} - \overrightarrow{OA} = \vec{i} + \frac{1}{2}\vec{j} - \vec{k}$$

AD的晶列指数为: $[2\bar{1}2]$

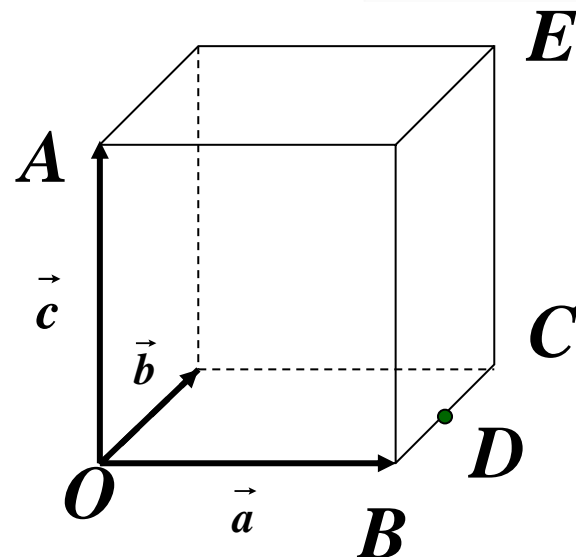
注意:

(1) 晶列指数一定是一组互质的整数;

(2) 晶列指数用方括号表示[];

(3) 遇到负数在该数上方加一横线。

(4) 等效晶向。



~~晶列 (11-1)~~

~~晶列 [11-1]~~

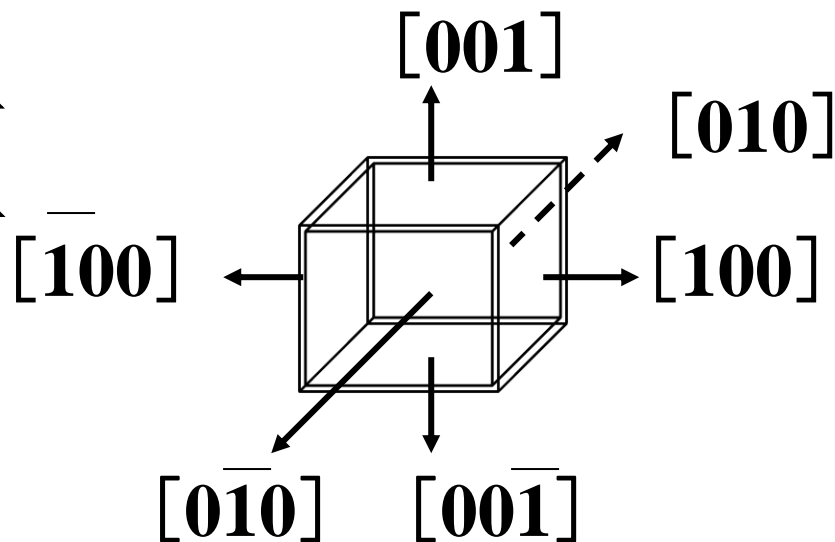
~~晶列 (111)~~

晶列 $[1\bar{1}1]$ ✓



3.4.1 晶列、晶向及晶向指数

在立方体中有，沿立方边的晶列一共有6个不同的晶向，由于晶格的对称性，这6个晶向并没有什么区别，晶体在这些方向上的性质是完全相同的，统称这些方向为**等效晶向**，写成 $\langle 100 \rangle$ 。





3.4.2 晶面及密勒指数

1. 晶面

在晶格中，通过任意三个不在同一直线上的格点作一平面，称为晶面，描写晶面方位的一组数称为**晶面指数**。

- (1) 平行的晶面组成晶面族，晶面族包含所有格点；
- (2) 晶面上格点分布具有周期性；
- (3) 同一晶面族中的每一晶面上，格点分布(情况)相同；
- (4) 同一晶面族中相邻晶面间距相等。

2. 晶面指数

晶面方位 { 晶面的法线方向（法线方向与三个坐标轴夹角）
晶面在三个坐标轴上的截距

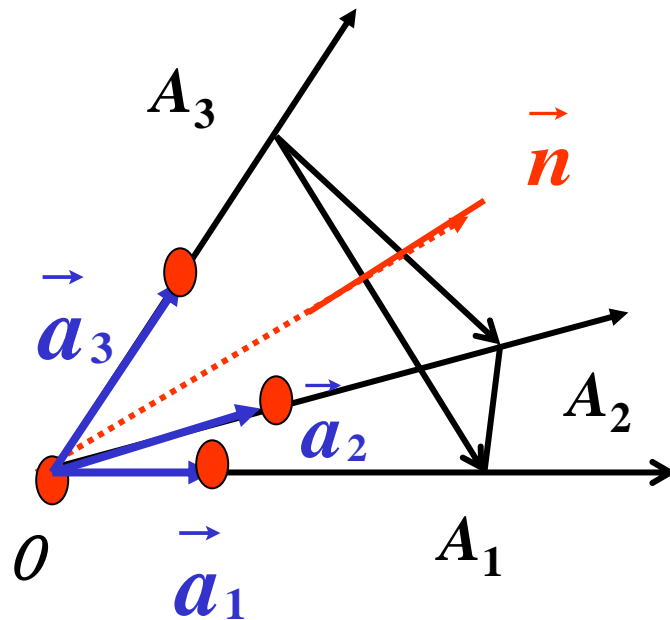


3.4.2 晶面及密勒指数

(1) 以原胞基矢表示

如图取一格点为顶点，原胞的三个基矢 $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ 为坐标系的三个轴，设某一晶面与三个坐标轴分别交于 A_1, A_2, A_3 ，设晶面的法线 ON 交晶面 $A_1A_2A_3$ 于 N ， ON 长度为 μd ， d 为该晶面族相邻晶面间的距离， μ 为整数，该晶面法线方向的单位矢量用 \vec{n} 表示，则晶面 $A_1A_2A_3$ 的方程为：

$$\vec{X} \cdot \vec{n} = \mu d$$





3.4.2 晶面及密勒指数

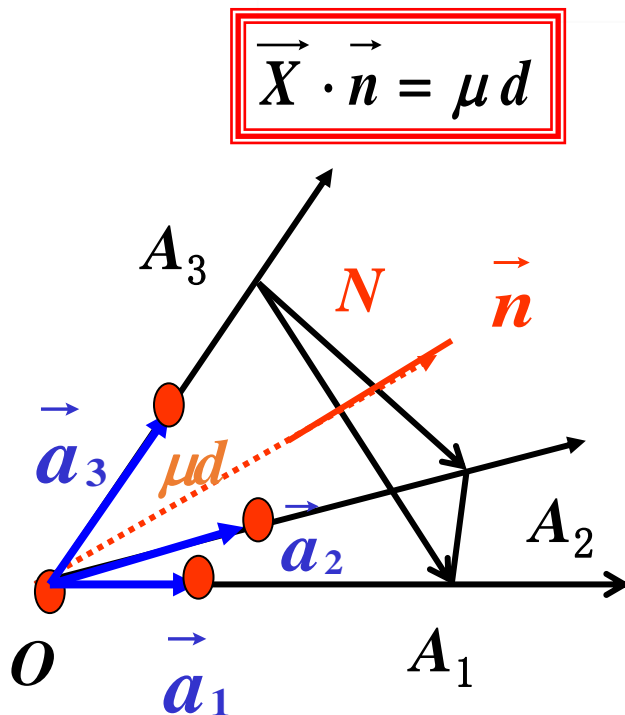
设 $\overrightarrow{OA_1} = r\vec{a}_1, \overrightarrow{OA_2} = s\vec{a}_2, \overrightarrow{OA_3} = t\vec{a}_3$

$$\left\{ \begin{array}{l} r\vec{a}_1 \cdot \vec{n} = \mu d \\ s\vec{a}_2 \cdot \vec{n} = \mu d \\ t\vec{a}_3 \cdot \vec{n} = \mu d \end{array} \right. \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} r a_1 \cos(\vec{a}_1, \vec{n}) = \mu d \\ s a_2 \cos(\vec{a}_2, \vec{n}) = \mu d \\ t a_3 \cos(\vec{a}_3, \vec{n}) = \mu d \end{array} \right.$$

取 a_1, a_2, a_3 为天然长度单位, 则得:

$$\cos(\vec{a}_1, \vec{n}) : \cos(\vec{a}_2, \vec{n}) : \cos(\vec{a}_3, \vec{n}) = \frac{1}{r} : \frac{1}{s} : \frac{1}{t}$$

晶面的法线方向与三个坐标轴(基矢)的夹角的余弦之比,
等于晶面在三个轴上的截距的倒数之比。





3. 4. 2 晶面及密勒指数

$$\cos(\vec{a}_1, \vec{n}) : \cos(\vec{a}_2, \vec{n}) : \cos(\vec{a}_3, \vec{n}) = \frac{1}{r} : \frac{1}{s} : \frac{1}{t}$$

设 $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ 的末端上的格点分别在离原点距离 h_1d 、 h_2d 、 h_3d 的晶面上，这里 h_1 、 h_2 、 h_3 为整数。

(1) 所有格点都包容在一族晶面上；因此给定晶面族中必有一个晶面通过坐标系的原点；在基矢 $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ 末端上的格点也一定落在该晶面族的晶面上；

(2) 同一晶面族中的晶面平行且相邻晶面间距相等，故在一点与基矢的末端间一定只有整数个晶面。



3.4.2 晶面及密勒指数

$$\begin{cases} \vec{a}_1 \cdot \vec{n} = h_1 d \\ \vec{a}_2 \cdot \vec{n} = h_2 d \\ \vec{a}_3 \cdot \vec{n} = h_3 d \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} a_1 \cos(\vec{a}_1, \vec{n}) = h_1 d \\ a_2 \cos(\vec{a}_2, \vec{n}) = h_2 d \\ a_3 \cos(\vec{a}_3, \vec{n}) = h_3 d \end{cases}$$

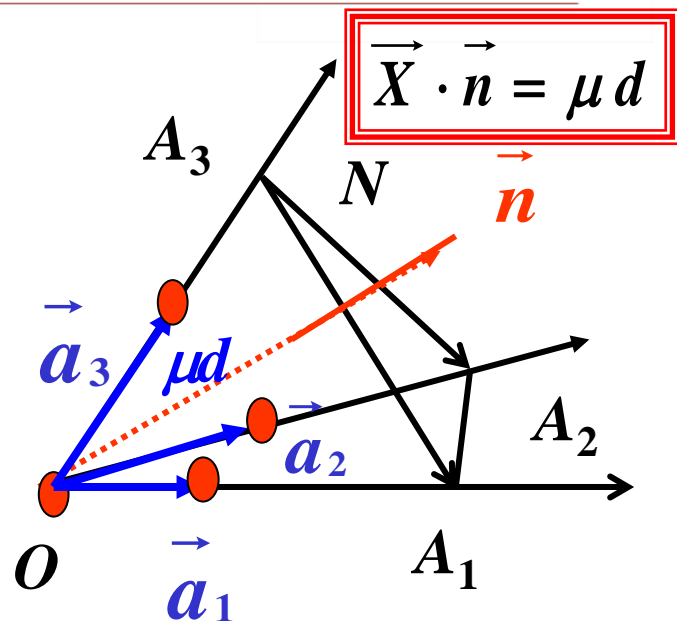
取 a_1, a_2, a_3 为天然长度单位得:

$$\cos(a_1, n) : \cos(a_2, n) : \cos(a_3, n) = h_1 : h_2 : h_3$$

晶面的法线与三个基矢的夹角余弦之比等于三个整数之比。

$$\text{又 } \cos(a_1, n) : \cos(a_2, n) : \cos(a_3, n) = \frac{1}{r} : \frac{1}{s} : \frac{1}{t}$$

$$h_1 : h_2 : h_3 = \frac{1}{r} : \frac{1}{s} : \frac{1}{t}$$





3.4.2 晶面及密勒指数

$$h_1 : h_2 : h_3 = \frac{1}{r} : \frac{1}{s} : \frac{1}{t}$$

h_1, h_2, h_3 是互质的，称它们为该晶面族的面指数，记为 $(h_1 h_2 h_3)$ 。

综上所述，晶面指数 $(h_1 h_2 h_3)$ 表示的意义是；

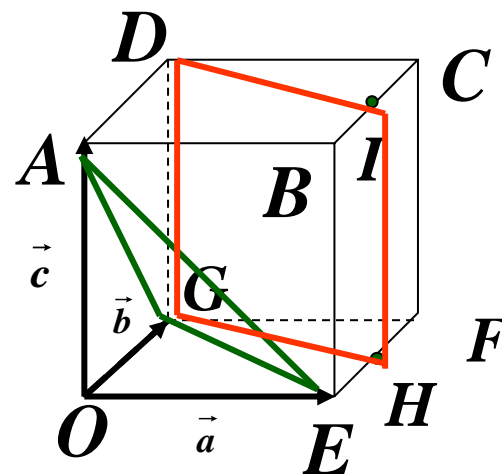
- (1) 基矢 $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ 被平行的晶面等间距的分割成 h_1 、 h_2 、 h_3 等份；
- (2) 以 a_1, a_2, a_3 为各轴的长度单位所求得的晶面在坐标轴上的截距倒数的互质比；
- (3) 晶面的法线与基矢夹角的方向余弦的比值。



3.4.2 晶面及密勒指数

(2) 以晶胞基矢 $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ 为坐标轴来表示的晶面指数称为**密勒指数**，用 (hkl) 表示。

例2：如图所示 $\vec{a} \perp \vec{b} \perp \vec{c}$ ， I 和 H 分别为 BC ， EF 之中点，试求晶面 AEG ， $ABCD$ ， $OEFG$ ， $DIHG$ 的密勒指数。



		AEG	$ABCD$	$DIHG$
在三个坐标	h'	1	∞	2
轴上的截距	k'	1	∞	1
	l'	1	1	∞



3. 4. 2 晶面及密勒指数

	<i>AEG</i>	<i>ABCD</i>	<i>DIHG</i>
在三个坐标	h'	∞	2
轴上的截距	k'	∞	1
	l'	1	∞
$h:k:l = \frac{1}{h'} : \frac{1}{k'} : \frac{1}{l'}$	$1:1:1$	$\frac{1}{\infty} : \frac{1}{\infty} : \frac{1}{1}$	$\frac{1}{2} : \frac{1}{1} : \frac{1}{\infty}$
(hkl)	(111)	(001)	(120)

AEG 的密勒指数是(111);

*ABCD*的密勒指数是(001);

*DIHG*的密勒指数是(120)。

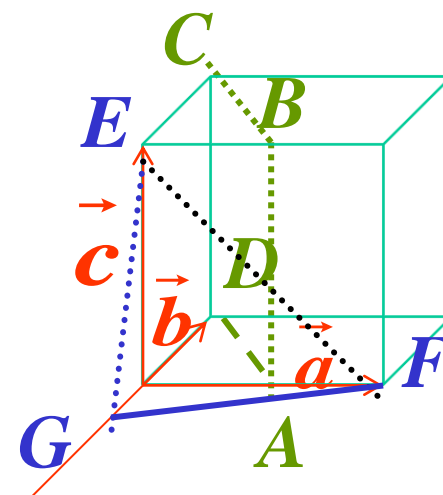


3.4.2 晶面及密勒指数

例3: 在立方晶系中画出(210)、 $(\bar{1}21)$ 晶面。

晶面在三个坐标轴上的截距分别为:

	\vec{a}	\vec{b}	\vec{c}
(210)	$\frac{1}{2}$	1	∞
$(\bar{1}21)$	1	$-\frac{1}{2}$	1



密勒指数是(210) 的晶面是 $ABCD$ 面;

密勒指数是 $(\bar{1}21)$ 的晶面是 EFG 面;



第五节 倒格

3.5.1 倒格定义

3.5.2 倒格与正格的关系

3.5.3 倒格与傅里叶变换



晶体结构=晶格+基元

一个晶体结构有两个格子，一个是正格，另一个为倒格。

正格

正格基矢 $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$

正格（点位）矢：

$$\vec{R}_n = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$$

倒格

倒格基矢 $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$

倒格（点位）矢：

$$\vec{K}_{h'} = h'_1 \vec{b}_1 + h'_2 \vec{b}_2 + h'_3 \vec{b}_3$$



3.5.1 倒格定义

倒格基矢定义为:

$$\begin{aligned}\vec{b}_1 &= \frac{2\pi}{\Omega} (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) \\ \vec{b}_2 &= \frac{2\pi}{\Omega} (\vec{a}_3 \times \vec{a}_1) \\ \vec{b}_3 &= \frac{2\pi}{\Omega} (\vec{a}_1 \times \vec{a}_2)\end{aligned}$$

其中 $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ 是正格基矢,

$$\Omega = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$$

是原胞体积

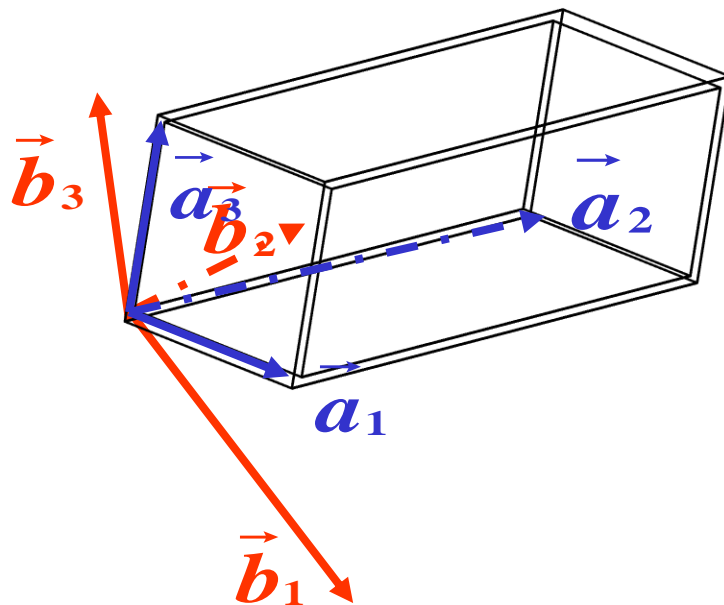
与 $\vec{K}_{h'} = h'_1 \vec{b}_1 + h'_2 \vec{b}_2 + h'_3 \vec{b}_3$ (h'_1, h'_2, h'_3 为整数) 所联系的各点的列阵即为倒格。



3.5.1 倒格定义

倒格基矢的方向和长度如何呢？

$$\begin{aligned}\vec{b}_1 &= \frac{2\pi}{\Omega} (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) \\ \vec{b}_2 &= \frac{2\pi}{\Omega} (\vec{a}_3 \times \vec{a}_1) \\ \vec{b}_3 &= \frac{2\pi}{\Omega} (\vec{a}_1 \times \vec{a}_2)\end{aligned}$$



$$|\vec{b}_1| = 2\pi \frac{|\vec{a}_2 \times \vec{a}_3|}{\Omega} = \frac{2\pi}{d_1} \quad |\vec{b}_2| = \frac{2\pi}{d_2} \quad |\vec{b}_3| = \frac{2\pi}{d_3}$$

一个倒格基矢是和正格原胞中一组晶面对应的，它的方向是该晶面的法线方向，它的大小则为该晶面族面间距倒数的 2π 倍。



3.5.2 倒格与正格的关系

$$1. \quad \vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi \delta_{ij} = \begin{cases} 2\pi & (i = j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases}$$

$$\vec{a}_1 \cdot \vec{b}_1 = \vec{a}_1 \cdot \frac{2\pi(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}{\Omega} = 2\pi$$

$$\vec{a}_1 \cdot \vec{b}_2 = \vec{a}_1 \cdot \frac{2\pi(\vec{a}_3 \times \vec{a}_1)}{\Omega} = 0$$

$$2. \quad \vec{R}_{l'} \cdot \vec{K}_{h'} = 2\pi\mu \quad (\mu \text{为整数})$$

其中 $\vec{R}_{l'}$ 和 $\vec{K}_{h'}$ 分别为正格点位矢和倒格点位矢

$$\vec{R}_{l'} = l'_1 \vec{a}_1 + l'_2 \vec{a}_2 + l'_3 \vec{a}_3 \quad \vec{K}_{h'} = h'_1 \vec{b}_1 + h'_2 \vec{b}_2 + h'_3 \vec{b}_3$$



3.5.2 倒格与正格的关系

$$\begin{aligned}\vec{R}_{l'} \cdot \vec{K}_{h'} &= (l'_1 \vec{a}_1 + l'_2 \vec{a}_2 + l'_3 \vec{a}_3) (h'_1 \vec{b}_1 + h'_2 \vec{b}_2 + h'_3 \vec{b}_3) \\ &= 2\pi(l'_1 h'_1 + l'_2 h'_2 + l'_3 h'_3) \\ &= 2\pi\mu\end{aligned}$$

3. $\Omega^* = \frac{(2\pi)^3}{\Omega}$ (其中 Ω 和 Ω^* 分别为正、倒格原胞体积)

$$\begin{aligned}\Omega^* &= \vec{b}_1 \cdot (\vec{b}_2 \times \vec{b}_3) \\ &= \left(\frac{2\pi}{\Omega}\right)^3 (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) \cdot [(\vec{a}_3 \times \vec{a}_1) \times (\vec{a}_1 \times \vec{a}_2)]\end{aligned}$$

$$\vec{A} \times (\vec{B} \times \vec{C}) = (\vec{A} \cdot \vec{C})\vec{B} - (\vec{A} \cdot \vec{B})\vec{C}$$



3.5.2 倒格与正格的关系

$$\begin{aligned} & [(\vec{a}_3 \times \vec{a}_1) \times (\vec{a}_1 \times \vec{a}_2)] \\ &= [(\vec{a}_3 \times \vec{a}_1) \cdot \vec{a}_2] \vec{a}_1 - [(\vec{a}_3 \times \vec{a}_1) \cdot \vec{a}_1] \vec{a}_2 \\ &= \Omega \vec{a}_1 \end{aligned}$$

$$\vec{A} \times (\vec{B} \times \vec{C}) = (\vec{A} \cdot \vec{C}) \vec{B} - (\vec{A} \cdot \vec{B}) \vec{C}$$

$$\Omega^* = \left(\frac{2\pi}{\Omega} \right)^3 (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) \cdot \Omega \vec{a}_1 = \frac{(2\pi)^3}{\Omega}$$

4. 倒格矢 $\vec{K}_h = h_1 \vec{b}_1 + h_2 \vec{b}_2 + h_3 \vec{b}_3$ 与正格中晶面族 $(h_1 h_2 h_3)$

正交，且其长度为 $\frac{2\pi}{d_{h_1 h_2 h_3}}$ 。

(1) 证明 $\vec{K}_h = h_1 \vec{b}_1 + h_2 \vec{b}_2 + h_3 \vec{b}_3$ 与晶面族 $(h_1 h_2 h_3)$ 正交。



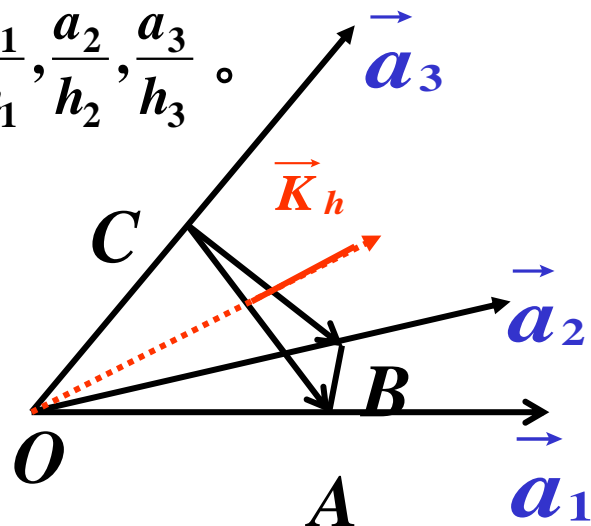
3.5.2 倒格与正格的关系

设 ABC 为晶面族 $(h_1h_2h_3)$ 中离原点最近的晶面，

ABC 在基矢 $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ 上的 截距分别为 $\frac{a_1}{h_1}, \frac{a_2}{h_2}, \frac{a_3}{h_3}$ 。

由图可知： $\vec{CA} = \vec{OA} - \vec{OC} = \frac{\vec{a}_1}{h_1} - \frac{\vec{a}_3}{h_3}$

$$\vec{CB} = \vec{OB} - \vec{OC} = \frac{\vec{a}_2}{h_2} - \frac{\vec{a}_3}{h_3}$$



$$\vec{K}_h \cdot \vec{CA} = (h_1\vec{b}_1 + h_2\vec{b}_2 + h_3\vec{b}_3) \cdot \left(\frac{\vec{a}_1}{h_1} - \frac{\vec{a}_3}{h_3} \right) = 0$$

$$\vec{K}_h \cdot \vec{CB} = (h_1\vec{b}_1 + h_2\vec{b}_2 + h_3\vec{b}_3) \cdot \left(\frac{\vec{a}_2}{h_2} - \frac{\vec{a}_3}{h_3} \right) = 0$$

所以 $\vec{K}_h = h_1\vec{b}_1 + h_2\vec{b}_2 + h_3\vec{b}_3$ 与晶面族 $(h_1h_2h_3)$ 正交。



3.5.2 倒格与正格的关系

(2)证明 $\vec{K}_h = h_1 \vec{b}_1 + h_2 \vec{b}_2 + h_3 \vec{b}_3$ 的长度等于 $\frac{2\pi}{d_{h_1 h_2 h_3}}$ 。

由平面方程: $\vec{X} \cdot \vec{n} = \mu d$ 得:

$$d_{h_1 h_2 h_3} = \frac{\vec{a}_1}{h_1} \cdot \frac{\vec{K}_h}{|\vec{K}_h|} = \frac{\vec{a}_1}{h_1} \cdot \frac{h_1 \vec{b}_1 + h_2 \vec{b}_2 + h_3 \vec{b}_3}{|\vec{K}_h|} = \frac{2\pi}{|\vec{K}_h|}$$

$$|\vec{K}_h| = \frac{2\pi}{d_{h_1 h_2 h_3}}$$



3.5.2 倒格与正格的关系

总结：倒格与正格的关系

$$1. \quad \vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi \delta_{ij} = \begin{cases} 2\pi & (i = j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases}$$

$$2. \quad \vec{R}_{l'} \cdot \vec{K}_{h'} = 2\pi\mu \quad (\mu \text{ 为整数})$$

$$3. \quad \Omega^* = \frac{(2\pi)^3}{\Omega} \quad (\text{其中 } \Omega \text{ 和 } \Omega^* \text{ 分别为正、倒格原胞体积})$$

$$4. \quad \text{倒格矢 } \vec{K}_h = h_1 \vec{b}_1 + h_2 \vec{b}_2 + h_3 \vec{b}_3 \text{ 与正格中晶面族 } (h_1 h_2 h_3)$$

正交，且其长度为 $\frac{2\pi}{d_{h_1 h_2 h_3}}$ 。



3.5.2 倒格与正格的关系

在晶胞坐标系 $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ 中,

$$\vec{a}^* = \frac{2\pi}{\Omega} (\vec{b} \times \vec{c})$$

$$\Omega = (\vec{a} \times \vec{b}) \cdot \vec{c}$$

$$\vec{b}^* = \frac{2\pi}{\Omega} (\vec{c} \times \vec{a})$$

$$\vec{K}_{h'k'l'} = h' \vec{a}^* + k' \vec{b}^* + l' \vec{c}^*$$

$$\vec{c}^* = \frac{2\pi}{\Omega} (\vec{a} \times \vec{b})$$



3.5.2 倒格与正格的关系

晶体结构

正格

1. $\vec{R}_n = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$
2. 与晶体中原子位置相对应;
3. 是真实空间中点的周期性排列; 晶格
4. 线度量纲为[长度]

倒格

1. $\vec{K}_n = h'_1 \vec{b}_1 + h'_2 \vec{b}_2 + h'_3 \vec{b}_3$
2. 与晶体中一族晶面对应;
3. 是与真实空间相联系的傅里叶空间中点的周期性排列; 布里渊区
4. 线度量纲为[长度]⁻¹



3.5.2 倒格与正格的关系

已知晶体结构如何求其倒格呢？



$$\begin{aligned}\vec{b}_1 &= \frac{2\pi}{\Omega} (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) \\ \vec{b}_2 &= \frac{2\pi}{\Omega} (\vec{a}_3 \times \vec{a}_1) \\ \vec{b}_3 &= \frac{2\pi}{\Omega} (\vec{a}_1 \times \vec{a}_2)\end{aligned}$$

$$\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3 \quad \vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$$

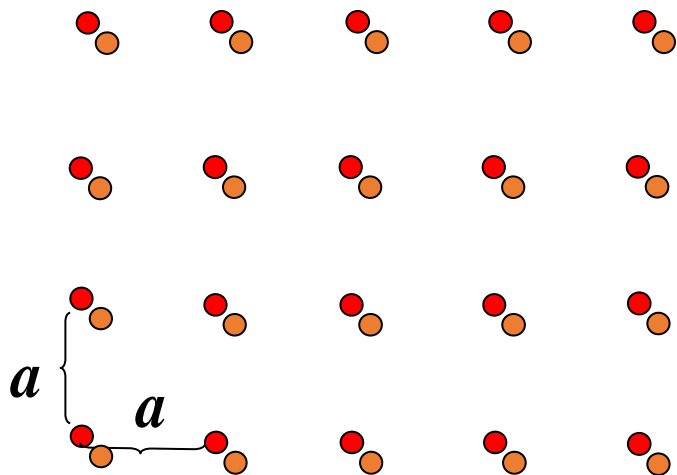
$$\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi \delta_{ij} = \begin{cases} 2\pi & (i = j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases}$$

$$\vec{K}_h = h_1 \vec{b}_1 + h_2 \vec{b}_2 + h_3 \vec{b}_3$$

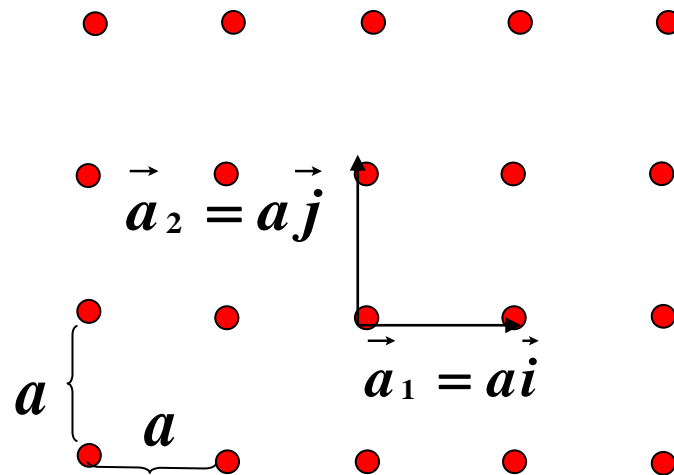


3.5.2 倒格与正格的关系

例1：下图是一个二维晶体结构图，试画出其倒格点的排列。



$$\begin{cases} \vec{a}_1 = a\vec{i} \\ \vec{a}_2 = a\vec{j} \end{cases}$$



$$\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi\delta_{ij} = \begin{cases} 2\pi & (i = j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases}$$

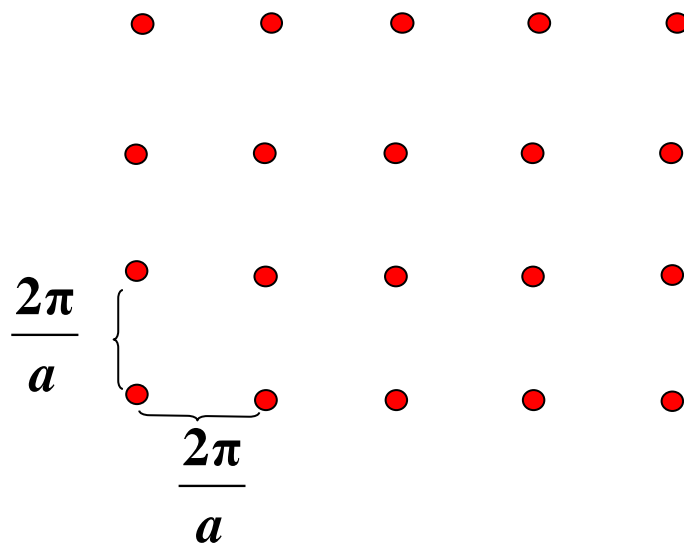


3.5.2 倒格与正格的关系

$$\begin{cases} \vec{a}_1 = a\vec{i} \\ \vec{a}_2 = a\vec{j} \end{cases}$$

$$\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi\delta_{ij} = \begin{cases} 2\pi & (i = j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \vec{a}_1 \cdot \vec{b}_1 = 2\pi \\ \vec{a}_1 \cdot \vec{b}_2 = 0 \\ \vec{a}_2 \cdot \vec{b}_1 = 0 \\ \vec{a}_2 \cdot \vec{b}_2 = 2\pi \end{cases}$$



$$\begin{cases} \vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}\vec{i} \\ \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}\vec{j} \end{cases}$$

$$\vec{K}_h = h_1\vec{b}_1 + h_2\vec{b}_2$$

倒格是边长为 $\frac{2\pi}{a}$ 的正方形格子。



3.5.2 倒格与正格的关系

例2：证明体心立方的倒格是面心立方。

解：体心立方的原胞基矢：

$$\begin{cases} \vec{a}_1 = \frac{a}{2}(-\vec{i} + \vec{j} + \vec{k}) \\ \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\vec{i} - \vec{j} + \vec{k}) \\ \vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\vec{i} + \vec{j} - \vec{k}) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \vec{b}_1 = \frac{2\pi}{\Omega}(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) \\ \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{\Omega}(\vec{a}_3 \times \vec{a}_1) \\ \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{\Omega}(\vec{a}_1 \times \vec{a}_2) \end{cases}$$

$$\Omega = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) = \frac{1}{2}a^3$$

$$\begin{aligned} \vec{a}_2 \times \vec{a}_3 &= \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ \frac{a}{2} & -\frac{a}{2} & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} & \frac{a}{2} & -\frac{a}{2} \end{vmatrix} = \vec{i} \begin{vmatrix} -\frac{a}{2} & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} & -\frac{a}{2} \end{vmatrix} + \vec{j} \begin{vmatrix} \frac{a}{2} & \frac{a}{2} \\ -\frac{a}{2} & \frac{a}{2} \end{vmatrix} + \vec{k} \begin{vmatrix} \frac{a}{2} & -\frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} & \frac{a}{2} \end{vmatrix} \\ &= \frac{a^2}{2}\vec{j} + \frac{a^2}{2}\vec{k} \end{aligned}$$



3.5.2 倒格与正格的关系

$$\vec{a}_2 \times \vec{a}_3 = \frac{a^2}{2} \vec{j} + \frac{a^2}{2} \vec{k} \quad \Omega$$

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{\Omega} (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) = \frac{2\pi}{a^3/2} \frac{a^2}{2} (\vec{j} + \vec{k})$$

同理得：

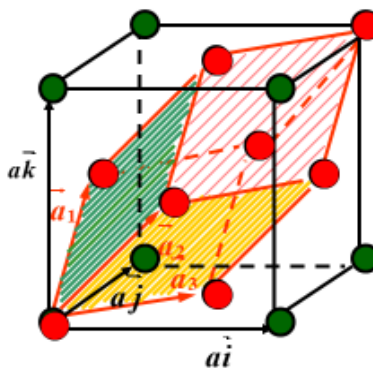
$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a} (\vec{i} + \vec{k})$$

$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a} (\vec{i} + \vec{j})$$

倒格矢：

$$\left\{ \begin{aligned} \vec{b}_1 &= \frac{2\pi}{a} (\vec{j} + \vec{k}) \\ \vec{b}_2 &= \frac{2\pi}{a} (\vec{i} + \vec{k}) \\ \vec{b}_3 &= \frac{2\pi}{a} (\vec{i} + \vec{j}) \end{aligned} \right.$$

(b) 面心立方



第一节课程内容

$$\left\{ \begin{aligned} \vec{a}_1 &= \frac{a}{2} (\vec{j} + \vec{k}) \\ \vec{a}_2 &= \frac{a}{2} (\vec{i} + \vec{k}) \\ \vec{a}_3 &= \frac{a}{2} (\vec{i} + \vec{j}) \end{aligned} \right.$$

体心立方的倒格是边长为 $4\pi/a$ 的面心立方。



3.5.2 倒格与正格的关系

$$d_{h_1 h_2 h_3} = \frac{a}{\sqrt{h_1^2 + h_2^2 + h_3^2}}$$



3.5.3 倒格与傅里叶变换

在任意两个原胞的相对对应点上，晶体的物理性质相同。

$$\Gamma(\vec{r} + \vec{R}_l) = \Gamma(\vec{r}) \quad \vec{R}_l \text{ 是正格矢。}$$

上式两边分别按傅里叶级数展开：

$$\begin{aligned} \Gamma(\vec{r}) &= \sum_h \Gamma(\vec{K}_h) e^{i\vec{K}_h \cdot \vec{r}} \\ \Gamma(\vec{r} + \vec{R}_l) &= \sum_h \Gamma(\vec{K}_h) e^{i\vec{K}_h \cdot (\vec{r} + \vec{R}_l)} \end{aligned} \quad \left. \vphantom{\sum_h} \right\} \begin{aligned} &\Rightarrow \vec{K}_h \cdot \vec{R}_l = 2\pi\mu \\ &\vec{K}_h \text{ 一定是倒格矢。} \end{aligned}$$



3.5.3 倒格与傅里叶变换

倒格子与傅里叶变换

设晶格中某点的某一物理量表示如下：

$$\vec{x} \longrightarrow V(\vec{x})$$

|| 晶格的周期性

$$\vec{x} + l_1 \vec{a}_1 + l_2 \vec{a}_2 + l_3 \vec{a}_3 \longrightarrow V(\vec{x} + l_1 \vec{a}_1 + l_2 \vec{a}_2 + l_3 \vec{a}_3)$$

傅里叶变换

$$\sum_{\vec{r}} V_{\vec{r}} e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}} = \sum_{\vec{G}} V_{\vec{G}} e^{i\vec{G} \cdot (\vec{x} + l_1 \vec{a}_1 + l_2 \vec{a}_2 + l_3 \vec{a}_3)}$$



3.5.3 倒格与傅里叶变换

显然有：

$$\longrightarrow e^{i\vec{G} \cdot (l_1 \vec{a}_1 + l_2 \vec{a}_2 + l_3 \vec{a}_3)} = 1$$

$$\vec{G} \cdot (l_1 \vec{a}_1 + l_2 \vec{a}_2 + l_3 \vec{a}_3) = 2\pi m \quad (m \text{ 为整数});$$

$$\vec{G} \cdot \vec{R} = 2\pi m (m \text{ 为整数})$$

所以，同一个物理量在正格子空间中的表述与在倒格子空间中的表述之间遵守傅里叶变换关系。

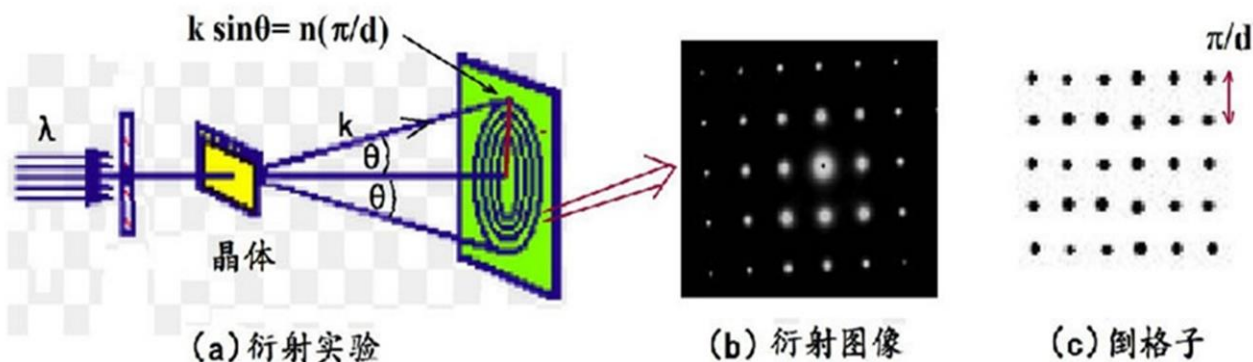
- 倒格子空间是正格子的倒易空间
- 周期性函数可以展开为傅里叶级数

同一物理量在正格子中的表述和在倒格子中的表述之间遵守傅里叶变换。



3.5.3 倒格与傅里叶变换

20世纪80年代STM问世前，人们无法直接观测到**晶体结构**，只能通过**XRD**观测到由晶体结构引起的X射线的**衍射图样**，再反推晶体结构。



任何一个晶体结构都对应两种结构（两种格子）：一个是晶体结构的格子叫作**正格子**，称为**正格子空间（位置空间）**；另一个是通过**XRD**观测的格子图样，叫作**倒格子**，称为**倒格子空间（状态空间）**。



第六节 晶体的对称性

对称性：经过某种动作后，晶体能够自身重合的特性。

对称操作：使晶体自身重合的动作。

对称素：对称操作所依赖的*几何要素*。



简单对称操作(旋转对称、中心反演、镜象、旋转反演对称)

(1) 旋转对称(C_n , 对称素为线)

若晶体绕某一固定轴转 $\frac{2\pi}{n}$ 以后自身重合, 则此轴称为 n 次(度)旋转对称轴。

下面我们计算与转动对应的变换矩阵。



当 OX 绕 Ox_1 转动角度 θ 时，图中

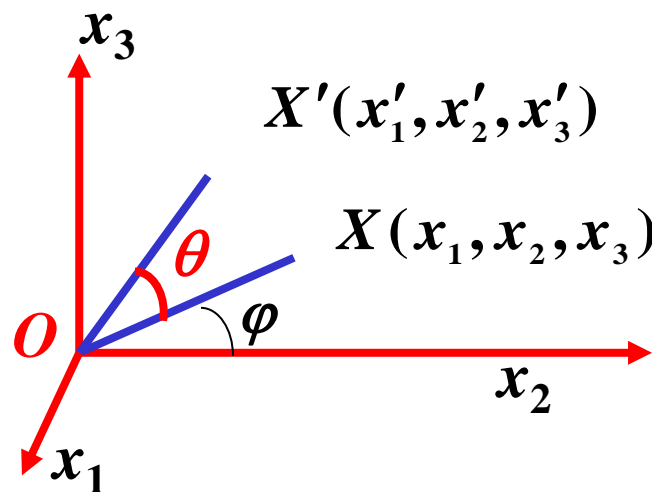
$$X(x_1, x_2, x_3) \Longrightarrow X'(x'_1, x'_2, x'_3)$$

若 OX 在 Ox_2x_3 平面上投影的长度为 R ，则

$$x'_1 = x_1$$

$$\begin{aligned} x'_2 &= R \cos(\theta + \varphi) = R \cos \theta \cos \varphi - R \sin \theta \sin \varphi \\ &= x_2 \cos \theta - x_3 \sin \theta \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} x'_3 &= R \sin(\theta + \varphi) = R \sin \theta \cos \varphi + R \cos \theta \sin \varphi \\ &= x_2 \sin \theta + x_3 \cos \theta \end{aligned}$$





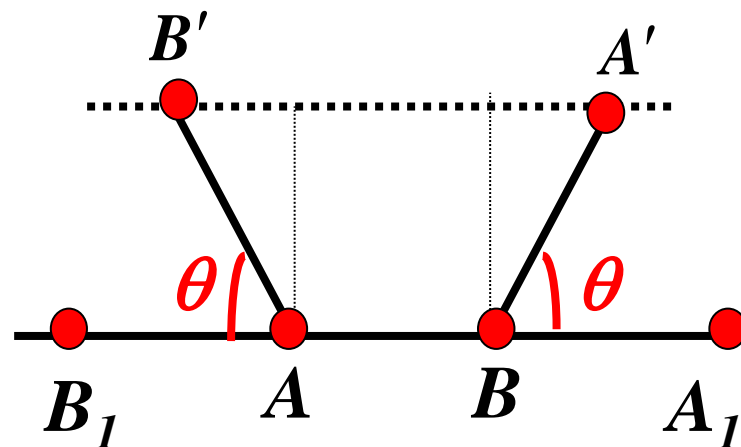
晶体的对称性

$$\begin{pmatrix} x'_1 \\ x'_2 \\ x'_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & -\sin \theta \\ 0 & \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$$

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & -\sin \theta \\ 0 & \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \quad |A| = 1$$

晶体中允许有几度旋转对称轴呢？

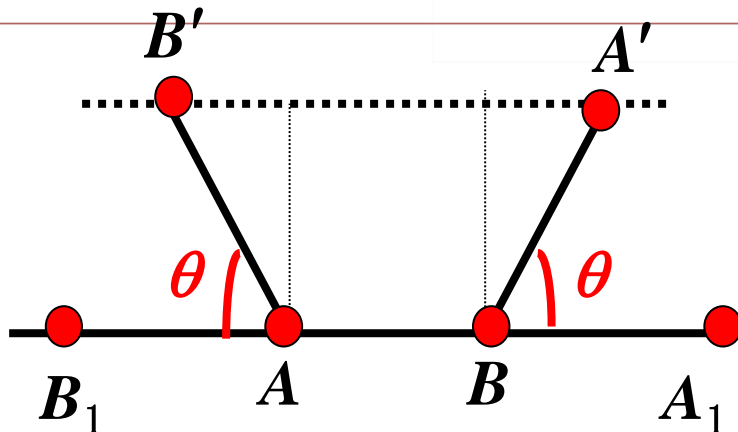
设 B_1ABA_1 是晶体中某一晶面上的一个晶列， AB 为这一晶列上相邻的两个格点。





晶体的对称性

若晶体绕通过格点A并垂直于纸面的u轴顺时针转 θ 角后能自身重合, 则由于晶体的周期性, 通过格点B也有一转轴u。



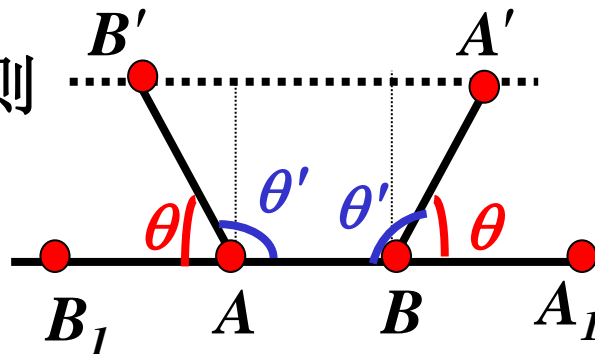
$$|A'B'| = |AB|(1 + 2\cos\theta), \quad |A'B'| \text{ 是 } |AB| \text{ 的整数倍,}$$

$$\cos\theta = 0, \frac{1}{2}, 1 \implies \theta = \frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{3}, 2\pi \implies \theta = \frac{2\pi}{4}, \frac{2\pi}{6}, \frac{2\pi}{1}$$

相反若逆时针转 θ' 角后能自身重合, 则

$$|A'B'| = |AB|(1 - 2\cos\theta'),$$

$$|A'B'| \text{ 是 } |AB| \text{ 的整数倍,}$$



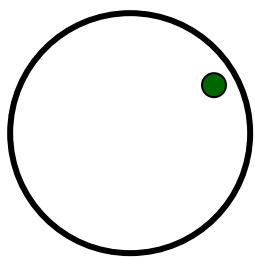


晶体的对称性

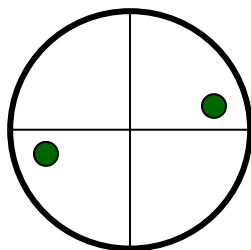
$$\cos \theta' = 0, -\frac{1}{2}, -1 \Rightarrow \theta' = \frac{\pi}{2}, \frac{2\pi}{3}, \pi \Rightarrow \theta' = \frac{2\pi}{4}, \frac{2\pi}{3}, \frac{2\pi}{2}$$

综合上述证明得: $\theta = \frac{2\pi}{n}, n = 1, 2, 3, 4, 6$

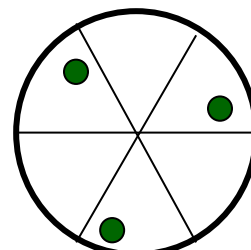
晶体中允许的旋转对称轴只能是1, 2, 3, 4, 6度轴。



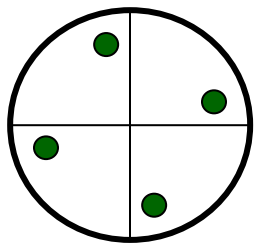
1



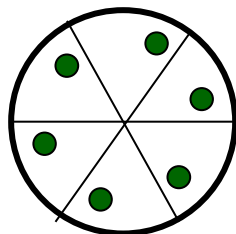
2



3



4

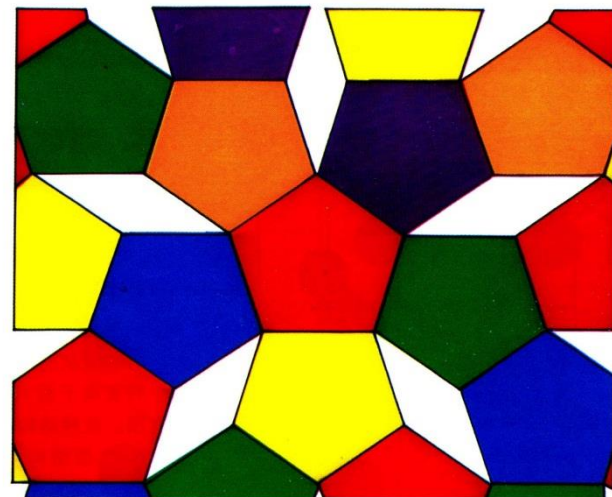


6



晶体的对称性

正五边形沿竖直轴每旋转 72° 恢复原状，但它不能重复排列充满一个平面而不出现空隙。因此晶体的旋转对称轴中不存在五次轴，只有1, 2, 3, 4, 6度旋转对称轴。



(2) 中心反演 (i , 对称素为点)

取中心为原点，经过中心反映后，图形中任一点

(x_1, x_2, x_3) 变为 $(-x_1, -x_2, -x_3)$

$$\begin{pmatrix} x'_1 \\ x'_2 \\ x'_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -x_1 \\ -x_2 \\ -x_3 \end{pmatrix} \quad A = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad |A| = -1$$



晶体的对称性

(3) 镜象(m , 对称素为面)

如以 $x_3=0$ 面作为对称面, 镜象是将图形的任何一点

(x_1, x_2, x_3) 变为 $(x_1, x_2, -x_3)$

$$\begin{pmatrix} x'_1 \\ x'_2 \\ x'_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ -x_3 \end{pmatrix} \quad A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad |A| = -1$$

(4) 旋转—反演对称

若晶体绕某一固定轴转 $\frac{2\pi}{n}$ 以后, 再经过中心反演, 晶体自身重合, 则此轴称为 n 次 (度) 旋转—反演对称轴。

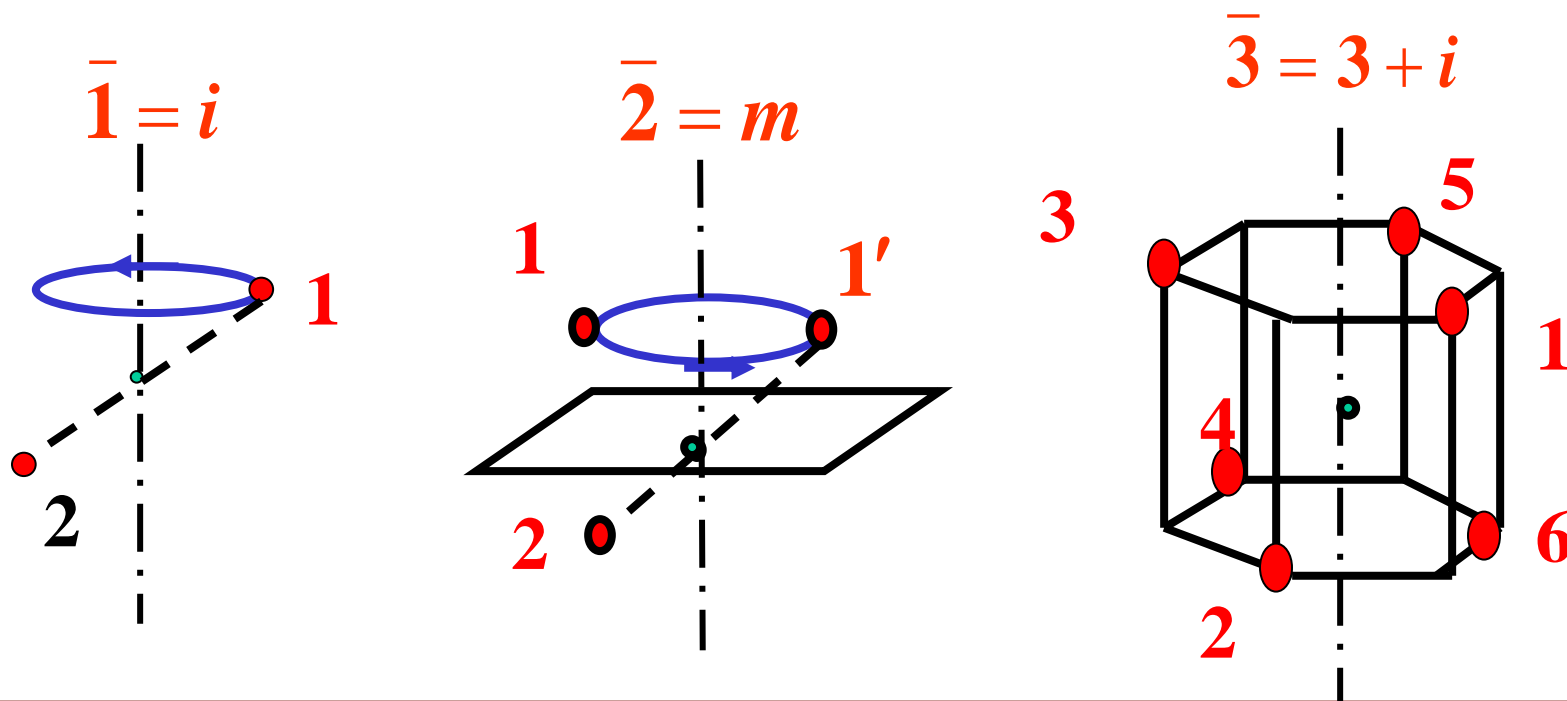


晶体的对称性

旋转—反演对称轴只能有1, 2, 3, 4, 6度轴。

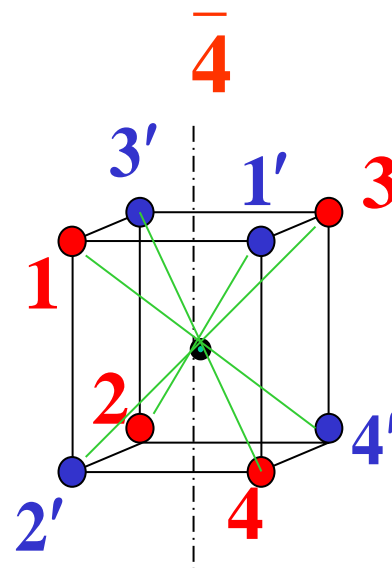
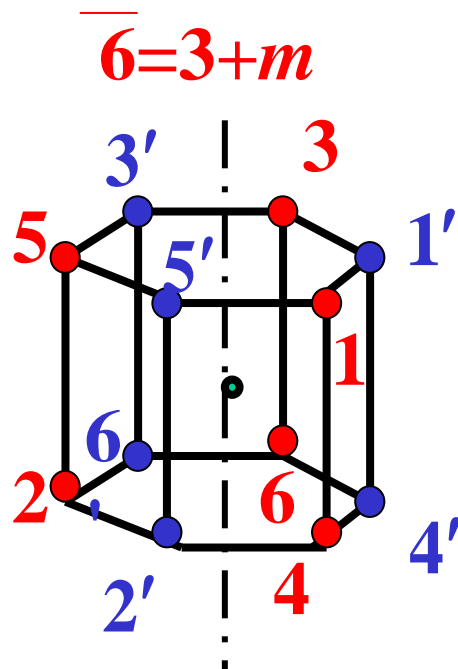
旋转—反演对称轴用 $\bar{1}, \bar{2}, \bar{3}, \bar{4}, \bar{6}$ 表示。

旋转—反演对称轴并不都是独立的基本对称素。如：





晶体的对称性





点对称操作：

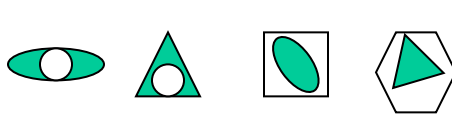
(1) 旋转对称操作：1, 2, 3, 4, 6 度旋转对称操作

C_1, C_2, C_3, C_4, C_6 (用熊夫利符号表示)



(2) 旋转反演对称操作：1, 2, 3, 4, 6度旋转反演对称操作。

S_1, S_2, S_3, S_4, S_6 (用熊夫利符号表示)



(3) 中心反演： i 。

(4) 镜象反映： m 。

独立的对称操作有8种, 即1, 2, 3, 4, 6, i , m , $\bar{4}$ 。

或 $C_1, C_2, C_3, C_4, C_6, C_i, C_s, S_4$ 。



所有点对称操作都可由这8种操作或它们的组合来完成。

一个晶体的全部对称操作构成一个群，每个操作都是群的一个元素。对称性不同的晶体属于不同的群。由旋转、中心反演、镜象和旋转—反演点对称操作构成的群，称作点群。

理论证明，所有晶体只有32种点群，即只有32种不同的点对称操作类型。这种对称性在宏观上表现为晶体外形的对称及物理性质在不同方向上的对称性。所以又称宏观对称性。

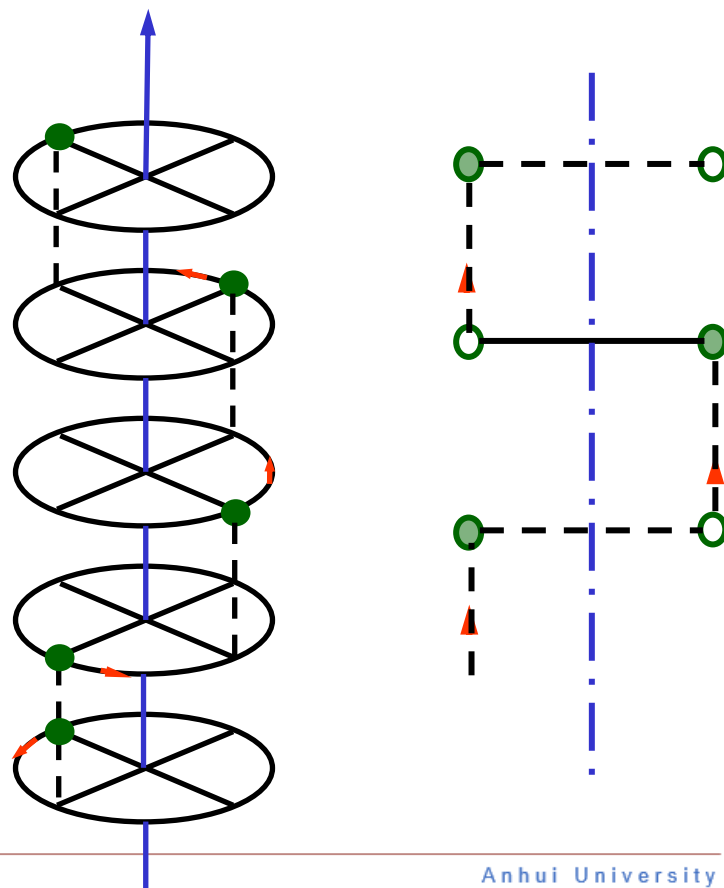
如果考虑平移，还有两种情况，即螺旋轴和滑移反映面。



晶体的对称性

(5) **n 度螺旋轴**: 若绕轴旋转 $2\pi/n$ 角以后, 再沿轴方向平移(T/n), 晶体能自身重合, 则称此轴为 n 度螺旋轴。其中 T 是轴方向的周期, 1 是小于 n 的整数。 n 只能取1、2、3、4、6。

(6) **滑移反映面**: 若经过某面进行镜象操作后, 再沿平行于该面的某个方向平移 T/n 后, 晶体能自身重合, 则称此面为滑移反映面。
 T 是平行方向的周期, n 可取2或4





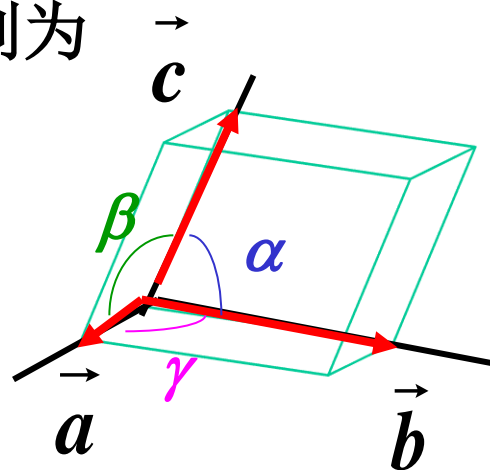
第七节 晶体结构的分类

点对称操作加上平移操作构成空间群。全部晶体构有**230种**空间群，即有**230种**对称类型。

根据不同的**点对称性**，将晶体分为**7大晶系**，**14种布拉维晶格**。

取 $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ 为晶胞三个基矢， α, β, γ 分别为 \vec{b} 与 \vec{c} , \vec{c} 与 \vec{a} , \vec{a} 与 \vec{b} 间的夹角。

7大晶系的特征及布拉维晶格如下所述：





晶体结构的分类

1. 三斜晶系: $a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma$ 简单三斜(1)

2. 单斜晶系: $a \neq b \neq c$ 简单单斜(2) 底心单斜(3)
 $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$

3. 三角晶系: $a = b = c$ 三角(4)
 $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ < 120^\circ$

4. 正交晶系: $a \neq b \neq c$ 简单正交(5), 底心正交(6) 体心正交(7), 面心正交(8)
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

5. 四角系: $a = b \neq c$ 简单四角(9), 体心四角(10)
(正方晶系) $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

6. 六角晶系: $a = b \neq c$ 六角(11)
 $\alpha = \beta = 90^\circ \quad \gamma = 120^\circ$

7. 立方晶系: $a = b = c$ 简立方(12), 体心立方(13), 面心立方(14)
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

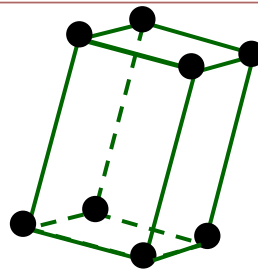


晶体结构的分类

1. 三斜晶系:

$$a \neq b \neq c,$$

$$\alpha \neq \beta \neq \gamma$$

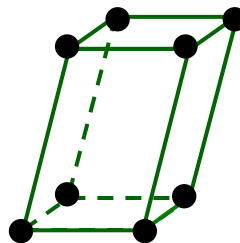


简单三斜(1)

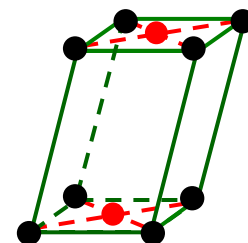
2. 单斜晶系:

$$a \neq b \neq c,$$

$$\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$$



简单单斜(2)

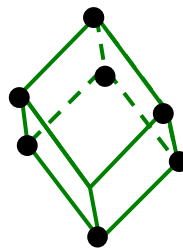


底心单斜(3)

3. 三角晶系:

$$a = b = c$$

$$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ < 120^\circ$$



三角(4)

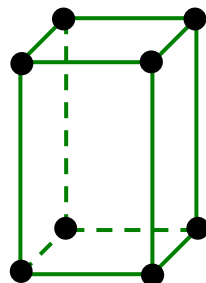


晶体结构的分类

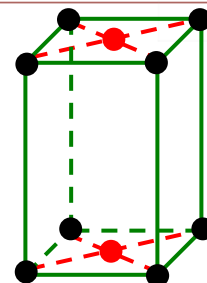
4. 正交晶系:

$$a \neq b \neq c,$$

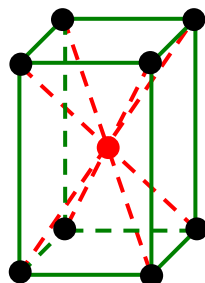
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



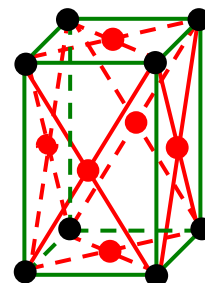
简单正交 (5)



底心正交 (6)



体心正交 (7)

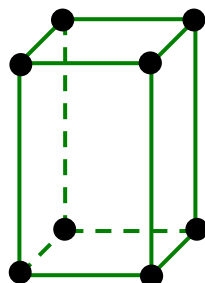


面心正交 (8)

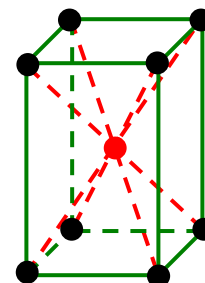
5. 四角系: (正方晶系)

$$a = b \neq c$$

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



简单四角 (9)



体心四角 (10)

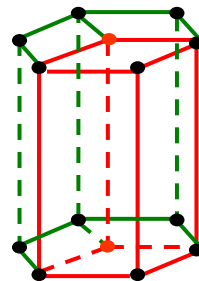


晶体结构的分类

6. 六角晶系:

$$a = b \neq c$$

$$\alpha = \beta = 90^\circ \quad \gamma = 120^\circ$$

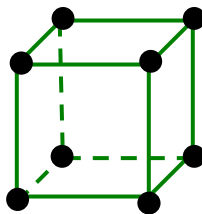


六角(11)

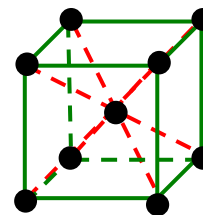
7. 立方晶系:

$$a = b = c$$

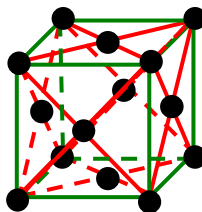
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



简立方(12)



体心立方(13)





晶体结构的分类

